Theoretische Physik

Zur relativistischen wellenmechanischen Theorie der Röntgenabsorption

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Schlesischen Friedrich-Wilhelms-Universität zu Breslau

vorgelegt von

Walter Hanke
aus Schreibendorf

Breslau 1940

Herstellung: VDI-Verlag GmbH, Berlin NW7; 1940

Referent: Prof. E. Fues
Korreferent: Prof. Cl. Schaefer

Tag der mündlichen Prüfung: 29. November 1939

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Schlesischen Friedrich-Wilhelms-Universität zu Breslau

R. UNIV.
BIBLIOTHEEK
LEIDEN

Einführung

Nach der relativistischen wellenmechanischen Theorie der Photoabsorption stellt [1] sich der atomare Absorptionskoeffizient als Summe von Matrixelementen

$$a_{ns} = \int \psi_n^* \vec{\alpha} \psi_s e^{i(\vec{k}\vec{r})} d\tau \qquad (1)$$

mit k' als Ausbreitungsvektor der Röntgenwelle, ausgeführt über sämtliche Übergänge aus dem betreffenden Grundzustand n in die möglichen kontinuierlichen Zustände s folgendermaßen dar:

$$\tau_a = 4\pi e^2 \cdot \lambda \sum_s a_{ns} a_{sn}^* \qquad (2)$$

Da der Exponent des im Matrixelement auftretenden Retardierungsfaktors von nur relativistischer Größenordnung ist [2], liegt es nahe, diesen Faktor zu entwickeln und damit das Matrixelement aufzulösen in Dipol-, Quadrupolglied u.s.w., welche sich jeweils um eine Größenordnung in der Feinstrukturkonstanten unterscheiden. Man wird sich also bei der Untersuchung des relativistischen Einflusses vorerst auf das Dipolglied beschränken, das man erhält, indem man in obigem Matrixelement den Retardierungsfaktor durch 1 ersetzt und nachträglich den Einfluß der Multipole zufügen. Das geschah auch in den Arbeiten von Roess [3] und Seiler [2], die sich mit demselben Gegenstand befaßten. Letzterer zog es vor, obige Strommatrix in eine Momentmatrix

$$\varkappa_{ns} = \int \psi_n^* \psi_s \cdot \varkappa \cdot d\tau$$

überzuführen (S. 341), die sich durch passende Wahl der Koordinatenrichtungen auf die einzige Komponente

$$Z_{ns} = \int \psi_n^* \psi_s \cdot z \, d\tau \qquad (3)$$

reduziert.

Da die beiden Matrixelemente nach

$$\varkappa_{ns} = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot i \cdot a_{ns_{o.\,Retard.}}$$

miteinander zusammenhängen, gilt dann statt (1) für den atomaren Absorptionskoeffizienten der Ausdruck

$$\tau_a = \frac{16 \cdot \pi^3 \cdot e^2}{\lambda} \sum_s |Z_{ns}|^2 \qquad (4)$$

mit der Wellenlänge im Nenner, der auch vorliegender Arbeit zugrundegelegt wird. Wegen der Unkenntnis der Eigenfunktionen für kompliziertere Atome ist man darauf angewiesen, das einzelne Atom als Wasserstoffatom mit Z-fach geladenem Kern und ebensoviel

1) Vgl. H. Bethe, Handb. d. Phys. 2.Aufl., S. 486.
2) K. Seiler, Ann. d. Phys. (5) 27, S.329, 1936; insbes. S.340.
3) L. C. Roess, Phys. Rev. 37, S.532, 1931.

gegenseitig sich nicht beeinflussenden Elektronen aufzufassen. In dieser Näherung soll wie in früheren Arbeiten auch hier die Berechnung, und zwar für die K-Schale und die drei L-Schalen als Ausgangsniveau, erfolgen. Jedoch wird am Schluß dem Einfluß der übrigen Elektronen auf das einzelne herausgegriffene Elektron pauschal durch Einführung einer inneren und äußeren Abschirmung Rechnung getragen.

Um die mit der relativistischen Rechnung verbundenen Schwierigkeiten zu überwinden, wurden von den beiden genannten Autoren verschiedene Wege eingeschlagen. Der zuerst angeführte führt die Berechnung seines Matrixelements in Form einer Entwicklung in eine wenig konvergente, komplexe hypergeometrische Reihe durch, diese stellt er durch das entsprechende Integral dar und nimmt dessen Auswertung für einzelne Punkte durch numerische Integration des Integranden vor. Letzterer dagegen entwickelt nach der Feinstrukturkonstanten, nimmt dafür Schwierigkeiten bei der Ausführung der Integration in Kauf und glaubt nun, dafür einen leichter auszuwertenden Ausdruck zu erhalten. In der vorliegenden Arbeit gelangt neben einem numerischen Auswertungsverfahren ähnlich dem des zuerst genannten Autors ein weiterer Gedanke zur Ausführung, der durch folgenden Umstand nahe gelegt wird. Seit jeher konstatieren die Experimentatoren, daß der Logarithmus des Absorptionskoeffizienten linear mit dem Logarithmus der Wellenlänge zusammenhängt. Zum selben Ergebnis führt auch die Theorie, ausgenommen jedoch für die Nachbarschaft der Kante, wo, wie aus Stobbes [1] unrelativistischen Rechnungen hervorgeht, eine Krümmung nach unten vorhanden ist. Um hierfür ein Maß zu gewinnen, wollen wir zuerst auf die Bestimmung der Schlußtangente bei $\lambda = \lambda_k$ unser Augenmerk richten. Der Einfachheit wegen sei jedoch zunächst τ_a selbst nach $\lambda_k / \lambda - 1$ bis zum linearen Gliede entwickelt, um später durch einfache Umformung (s. S. 19) zu der logarithmischen Darstellung überzugehen. Da für einen bestimmten Grundzustand die Wellenlänge allein von der Energie des auslaufenden Elektrons abhängt, läuft die Lösung der gestellten Aufgabe darauf hinaus, eine Entwickelung der relativistischen kontinuierlichen Radialeigenfunktion bei $\lambda = \lambda_k$ anzugeben, womit sich der folgende erste Abschnitt beschäftigen wird.

§ 1. Entwickelung der kontinuierlichen Eigenfunktion an der Kante

Die großen und kleinen Diracschen Radialeigenfunktionen des kontinuierlichen Zustands seien wie folgt angeführt [2]:

$$\left.\begin{matrix} g(r) = \\ f(r) = \end{matrix}\right\} N_r \cdot e^{-k\varrho} \cdot \varrho^{\gamma-1} \left\{\begin{matrix} X + Y \\ \vartheta (X - Y) \end{matrix}\right. \qquad (5a)$$

wo k nach (5e) imaginär ist; mit dem Normierungsfaktor:

$$|N_r|^2 = \frac{4^\gamma \cdot e^{\pi |n|} (1 + kn) |k|^{2\gamma-1}}{4\pi e^2 (2\gamma)!^2} |\Gamma(n+\gamma)|^2, \qquad (5b)$$

1) M. Stobbe, Ann. d. Phys. (5) 7, S.661, 1930.
2) Vgl. K. Seiler, a.a.O. S. 345 und
F. Sauter, Ann. d. Phys. 11, S. 344, 1931.

den entarteten hypergeometrischen Funktionen:

$$X = \left(-\kappa + \frac{1}{k}\right)\left(1 + \frac{\gamma - n}{2\gamma + 1}\cdot\frac{x}{n} + \frac{(\gamma-n)(\gamma-n+1)}{2!\,(2\gamma+1)(2\gamma+2)}\cdot\left(\frac{x}{n}\right)^2 + \cdots\right)$$

$$Y = (\gamma - n)\left(1 + \frac{\gamma-n+1}{2\gamma+1}\cdot\frac{x}{n} + \frac{(\gamma-n+1)(\gamma-n+2)}{2!\,(2\gamma+1)(2\gamma+2)}\cdot\left(\frac{x}{n}\right)^2 + \cdots\right), \qquad (5c)$$

und folgender Bedeutung der eingehenden Parameter:

$$\gamma = \sqrt{\kappa^2 - \varepsilon} \quad \text{mit} \quad \varepsilon = (\alpha Z)^2$$
$$X = 2\,k\,n\cdot\varrho \quad \text{mit} \quad \varrho = Z\cdot r \qquad (5d)$$
$$\kappa = \ell \text{ für } j = \ell - \tfrac{1}{2} \text{ und } = -(\ell+1) \text{ für } j = \ell + \tfrac{1}{2}$$

und den von der Energie des Elektrons und damit der Wellenlänge abhängigen Parametern:

$$k = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right)^2}; \quad n(k) = \frac{1}{k}\sqrt{1 - \varepsilon k^2}, \qquad (5e)$$

mit denen der in die kleinen Eigenfunktionen eingehende Faktor nach

$$\beta = \sqrt{\frac{1 - kn}{1 + kn}} \qquad (5f)$$

zusammenhängt.

An der Kante, wo, wie bereits in der Einführung gesagt, die Entwickelung zunächst vorgenommen werden soll, ist $E = E_0$; daher der Parameter k, nach dem wir an dieser Stelle entwickeln wollen, Null, während n wie 1/k unendlich groß wird. Wie bereits von den S. 1 genannten Autoren festgestellt, werden dann die in X und Y enthaltenen hypergeometrischen Reihen zu Reihen Besselscher Funktionen. Für die in die großen Eigenfunktionen eingehende Summe der Ausdrücke (5c) sei das gezeigt: Nach Ausführung der in zweiter Näherung gültigen Entwickelung von

$$\frac{1}{k} = n + \frac{\varepsilon}{2}k$$

erhält man:

$$X + Y = \left(\gamma - \kappa + \tfrac{\varepsilon}{2}k\right)\cdot \text{obere Reihe} + (\gamma - n)\frac{x}{n(2\gamma+1)}\cdot\left(1 + \frac{\gamma-n+1}{2\gamma+2}\cdot\frac{x}{n} + \frac{(\gamma-n+1)(\gamma-n+2)}{2!\,(2\gamma+2)(2\gamma+3)}\cdot\left(\frac{x}{n}\right)^2 + \cdots\right) \qquad (6)$$

woraus für unsern Sonderfall k = 0 folgt:

$$X + Y = (\gamma - \kappa)\left(1 - \frac{x}{2\gamma+1} + \frac{x^2}{2!\,(2\gamma+1)(2\gamma+2)} - + \cdots\right) - \frac{x}{2\gamma+1}\cdot\left(1 - \frac{x}{2\gamma+2} + \frac{x^2}{2!\,(2\gamma+2)(2\gamma+3)} - + \cdots\right)$$
$$= \frac{(2\gamma)!}{x^\gamma}\left[(\gamma - x)\,\mathfrak{J}_{2\gamma}\left(2\sqrt{x}\right) - \sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2\gamma+1}\left(2\sqrt{x}\right)\right] \qquad (7)$$

mit $x = 2\varrho$. Während, wie bereits S. 2 angeführt, die Berechnung des Matrixelements (3) im allgemeinen Falle auf kaum auswertbare komplexe hypergeometrische Reihen führt, gelangt man bei der entsprechenden Integration der Besselfunktionen statt der allge-

meinen Reihen (5c) auf gut konvergente, reelle entartete hypergeometrische Reihen, deren Auswertung daher keine Schwierigkeiten macht. Neben der 0-ten Näherung (7) lassen sich nun aber auch die Koeffizienten der Entwickelung nach k durch Besselfunktionen darstellen, und durch diesen Umstand, welcher beträchtliche rechnerische Vorteile mit sich bringt, wird der Gedanke unserer Entwickelung nahe gelegt. Zunächst sei das formal für den Koeffizienten des linearen Gliedes gezeigt: Von der oberen Reihe in (5c) bleiben nach Abzug von

$$\frac{(2z)!}{x^z}\,\mathfrak{J}_{2z}(2\sqrt{x}) \qquad \text{(s. Gl. 7)}$$

folgende Restglieder der Ordnung k übrig:

$$\frac{1}{2z+1}\cdot\frac{x}{n}\left[z-\frac{2z+1}{2z+2}\cdot\frac{x}{2!}+\frac{3z+3}{(2z+2)(2z+3)}\cdot\frac{x^2}{3!}-+\cdots\right]$$

Spaltet man hiervon eine Besselsche Reihe mit dem ersten Gliede γ ab, so geht, wie man sich leicht überzeugt, der Rest ebenfalls in einer Besselschen Reihe auf.

Für den Koeffizienten des Gliedes mit k^2 ist die restlose Zerlegung in Besselfunktionen schon schwieriger. Nach Abspaltung zweier Besselfunktionen wie bei dem des linearen Gliedes bleiben noch die folgenden beiden Reihen übrig:

$$R_z=\frac{x^{z+2}}{(2z+2)!}\cdot\left[\frac{z(z+1)}{2!}-\frac{z(z+1)+z(z+2)+(z+1)(z+2)}{3!\,(2z+3)}\,x+-\cdots\right]$$

und

$$R_{z+1}=\frac{x^{z+3}}{(2z+3)!}\cdot\left[\frac{(z+1)(z+2)}{2!}-+\cdots\right] \qquad (8)$$

wo z durch $(z+1)$ ersetzt ist.

Das Ergebnis unserer Entwickelung wird somit:

$$(X+Y)\cdot\frac{x^z}{(2z)!}=(z-\kappa)\,\mathfrak{J}_{2z}-\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}$$
$$+k\left[z(1+z-\kappa)\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}-\left(\tfrac{3}{2}z+1-\tfrac{\kappa}{2}\right)x\,\mathfrak{J}_{2z+2}+\tfrac{1}{2}x\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+3}+\tfrac{\varepsilon}{2}\,\mathfrak{J}_{2z}\right] \qquad (9$$
$$+k^2\left[\tfrac{\varepsilon}{2}z\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}+z(z+1)\left(1-\tfrac{\varepsilon}{2}\right)x\,\mathfrak{J}_{2z+2}-\tfrac{z}{2}x\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+3}+(z-\kappa)R_z-R_{z+1}\right]$$

mit $2\sqrt{x}$ als Argument der Besselfunktionen.

Anwendung der Beziehung $\mathfrak{J}_{r+1}+\mathfrak{J}_{r-1}=\frac{r}{\sqrt{x}}\mathfrak{J}_r$ zur Rekursion auf die Funktionen der Ordnung $2z$ und $(2z+1)$ allein führt zu folgender einfacheren Darstellung:

$$(X+Y)\cdot\frac{x^z}{(2z)!}=(z-\kappa)\mathfrak{J}_{2z}-\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}$$
$$+\tfrac{k}{2}\left[(z+\kappa-x)\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}+(\varepsilon+(z-\kappa)x)\mathfrak{J}_{2z}\right] \qquad (1$$
$$-\tfrac{k^2}{4}\left[(\varepsilon-2zx)\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+1}-\varepsilon x\,\mathfrak{J}_{2z}+4(\kappa-z)R_z+4R_{z+1}\right]$$

Die bisherige Entwickelung nach k ist indessen nicht vollständig, da die Größe $x = 2\,k\cdot n(k)\cdot\varrho$ im Argument der Besselfunktionen auch noch vom Entwickelungsparameter abhängt. Unter Heranziehung der Funktionentafeln von Jahnke & Emde (2.Aufl. S.213) erhält man leicht die Beziehung:

$$\mathfrak{J}_\nu(2\sqrt{x}) = \mathfrak{J}_\nu(\sqrt{8\varrho}) - \tfrac{\varepsilon}{4}k^2\begin{cases} -\nu\mathfrak{J}_\nu(\sqrt{8\varrho}) + \sqrt{8\varrho}\cdot\mathfrak{J}_{\nu-1}(\sqrt{8\varrho}) \\ \nu\mathfrak{J}_\nu(\sqrt{8\varrho}) - \sqrt{8\varrho}\cdot\mathfrak{J}_{\nu+1}(\sqrt{8\varrho}) \end{cases} \qquad (11)$$

Ferner ist:

$$x^3 = (2\varrho)^3\left[1 - \tfrac{\varepsilon}{2}\gamma k^2\right]$$

Damit folgt als Ergebnis der vollständigen Entwickelung nach k:

$$\begin{aligned} X+Y = \frac{(2z)!}{(2\varrho)^z}\Big\{ & -\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} + (z-\kappa)\,\mathfrak{J}_{2z} \\ & + \tfrac{k}{2}\left[(z+\kappa-2\varrho)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} + (\varepsilon+2(z-\kappa)\varrho)\,\mathfrak{J}_{2z}\right] \qquad (12) \\ & - \tfrac{k^2}{4}\left[(\varepsilon(1+2z+2\kappa) - 4z\varrho)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} - 6\varepsilon\varrho\,\mathfrak{J}_{2z} + 4(\kappa-z)R_z + 4R_{z+1}\right]\Big\} \end{aligned}$$

Es bleibt nun noch übrig, die Reihen (8) in Besselfunktionen aufzulösen. Während für die Darstellung der Reihe S. 4 oben zwei Besselfunktionen bereits ausreichten, bedarf es hier dreier Funktionen dieser Art. Eine erste Reihe erhält man wie dort, indem man, vom ersten Gliede ausgehend, eine Besselsche Reihe abspaltet, eine zweite entsprechend vom Rest des zweiten Gliedes aus. Was nun noch übrig bleibt, geht vollständig in einer dritten Reihe auf. Am besten läßt sich das wohl an Hand des folgenden Schemas erkennen, wo statt der einzelnen Glieder nur die im Zähler neu hinzutretenden Summenglieder mit der durch die Reihenabspaltung bedingten Zerlegung angeführt sind.

Nummer N des Gliedes	Zähler des N. Gliedes – denen der vorangehenden Glieder
1	$z(z+1) = z(z+1)$
2	$(2z+1)(z+2) = 2z(z+1) + 3z + 2$
3	$(3z+3)(z+3) = 3z(z+1) + 3(3z+2) + (1+2)$
4	$(4z+6)(z+4) = 4z(z+1) + 6(3z+2) + 2(3+3)$

Das so gewonnene Ergebnis ist

$$R_z = z(z+1)\,x\,\mathfrak{J}_{2z+2} - (z+\tfrac{2}{3})\,x\sqrt{x}\,\mathfrak{J}_{2z+3} + \tfrac{1}{4}x^2\mathfrak{J}_{2z+4}$$

Nach der üblichen Rekursion erhält man:

$$R_z - \tfrac{1}{6}\varrho\,(3x-2z\;\;2)\,\mathfrak{J}_{2z} + \tfrac{1}{6}\left((z+1)(2z+1)-2x\right)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1}$$

Für die Reihe R_{z+1} kann man das entsprechende Ergebnis sofort hinschreiben und hat nur noch die Rekursion auszuführen, welche einen ähnlichen Ausdruck ergibt.

Ebenso, wie die Koeffizienten des linearen und quadratischen Gliedes in k sich durch Besselfunktionen darstellen lassen, so darf man diese Eigenschaft auch von denen der weiteren Glieder erwarten; jedoch ist der allgemeine Beweis nicht gelungen.

Die nach demselben Verfahren durchgeführte Entwickelung der kleinen Diracfunktionen liefert mit $\sqrt{8\varrho}$ als Argument entsprechend Gleichung (12):

$$\frac{1}{n}(X-Y) = 2\cdot\frac{(2z)!}{(2\varrho)^z}\left\{\mathfrak{J}_{2z} - \frac{k}{2}(z+\kappa-2\varrho)\mathfrak{J}_{2z}\right.$$
$$\left. - \frac{k^2}{4}\left[(z-\kappa-2\varepsilon-2\varrho)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} + (2(z+\kappa)\varrho-\varepsilon)\mathfrak{J}_{2z} - 4R_z\right]\right\} \quad (13)$$

Im Normierungsfaktor (5b) entwickeln wir den absoluten Betrag der Γ-Funktion mit Hilfe der Stirlingschen Formel [1]:

$$|\Gamma(n+z)|^2 = 2\pi\,|n|^{2z-1}\cdot e^{-\pi/n}\left(1 - \frac{k^2}{6}z(z-1)(2z-1)\right) \quad (14)$$

Ferner findet man unschwer:

$$1 + kn = 2\left(1 - \frac{\varepsilon}{4}k^2\right); \qquad \vartheta = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2n}\left(1 - \frac{\varepsilon}{4}k^2\right) \quad (15)$$

In der Eigenfunktion (5a) tritt nunmehr unser Entwickelungsparameter nur noch in der Exponentialfunktion $e^{-k\varrho}$ unentwickelt auf. Wir entwickeln daher noch

$$e^{-k\varrho} = \left(1 - k\varrho + \frac{k^2}{2}\cdot\varrho^2 - \ldots + \ldots\right) \quad [2]$$

und erhalten schließlich als Entwickelung der kontinuierlichen relativistischen Eigenfunktion an der Kante:

$$g = \frac{\sqrt{z}}{\varrho}\left\{(z-\kappa)\mathfrak{J}_{2z} - \sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} + \frac{k}{2}\left[\varepsilon\mathfrak{J}_{2z} + (z+\kappa)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1}\right]\right.$$
$$+ \frac{k^2}{12}\left[\left(z(z-1)(2z-1) - (z+\kappa)(z+1)(2z+1) - \frac{3\varepsilon}{2}(3+4\kappa)\right)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} - 2(1+\kappa)\varrho\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1}\right. \quad (17)$$
$$\left.\left. + (\kappa-z)\left(z(z-1)(2z-1) + \frac{3\varepsilon}{2}(4z-1)\right)\mathfrak{J}_{2z} + 2\left((z+\kappa)(z+1)+6\varepsilon\right)\varrho\cdot\mathfrak{J}_{2z} + 4\varrho^2\mathfrak{J}_{2z}\right]\right\}$$

$$f = \frac{\sqrt{z\cdot\varepsilon}}{\varrho}\left\{\mathfrak{J}_{2z} - \frac{k}{2}(z+\kappa)\mathfrak{J}_{2z}\right.$$
$$- \frac{k^2}{4}\left[\left(z-\kappa-\frac{1}{3}(z+1)(2z+1) - 2\varepsilon\right)\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1} - \frac{2}{3}\varrho\cdot\sqrt{2\varrho}\,\mathfrak{J}_{2z+1}\right.$$
$$\left.\left. + \left(\frac{1}{3}z(z-1)(2z-1) + \varepsilon(2z-\tfrac{1}{2})\right)\mathfrak{J}_{2z} + \frac{2}{3}(z+1)\cdot\varrho\cdot\mathfrak{J}_{2z}\right]\right\}$$

---

1) Seiler Diss., a.a.O. S. 354.

2) Bei der nachfolgenden Integration nach ϱ bis $\varrho = \infty$ wird nämlich die Konvergenz durch einen andern Faktor erzwungen. Rechenproben haben ergeben, daß durch den Schritt (16) keine Verschlechterung eintritt.

§ 2. Anwendung der Entwickelung auf die Übergänge von der K-Schale

Zur Berechnung des Matrixelements (3), wozu wir jetzt kommen, setzt man die azimutalen Eigenfunktionen der betreffenden Zustände ein und führt die elementare Integration über ϑ, φ aus. Es bleibt dann nur eine Abhängigkeit von der radialen Koordinate noch übrig. Nach Seiler [1] erhält man so für die K-Schale als Ausgangs- und den Term $P\,\frac{1}{2}$ als Endzustand:

$$|Z|^2 = \frac{1}{9}\,|K + O|^2_{\kappa_I = 1} \qquad (19)$$

mit $K = \int G \cdot g \cdot \varrho^3 \cdot d\varrho\,; \qquad O = \int F \cdot f \cdot \varrho^3 \cdot d\varrho.$

Die hier eingehenden großen und kleinen Radialeigenfunktionen der K-Schale heißen:

$$\left.\begin{aligned} G &= \\ F &= \end{aligned}\right\} N_0 \begin{cases} e^{-\varrho} \cdot \varrho^{\gamma_0 - 1} \\ \sqrt{\frac{1-\gamma_0}{1+\gamma_0}} \cdot e^{-\varrho} \cdot \varrho^{\gamma_0 - 1} \end{cases} \qquad (20)$$

mit $|N_0|^2 = (1+\gamma_0)\,\frac{4^{\gamma_0}}{(2\gamma_0)!} \cdot Z^3$

Bei der Berechnung der Integrale K und O, worauf unsere Aufgabe nun hinausläuft, treten Integrale auf, deren Lösung nach Whittaker & Watson [2] leicht angegeben werden kann:

$$U_\beta(\alpha,t) = \sqrt{2}\int \mathfrak{J}_{2\alpha\pm1}(\sqrt{8\varrho}) \cdot e^{-\frac{\varrho}{t}} \cdot \varrho^{\beta+1} \cdot \sqrt{\varrho}\, d\varrho = \frac{\left\{\frac{1}{2}^{\alpha+1}\right\} t^{3+\alpha+\beta}\,(\{\tfrac{1}{2}\}+\alpha+\beta)!}{e^{2t}\,(2\alpha\pm1)!}\, F(\alpha-\beta-\{\tfrac{1}{2}\},\ 2\alpha+1\pm1,\ 2t)$$

$$V_\beta(\alpha,t) = \int \mathfrak{J}_{2\alpha}(\sqrt{8\varrho}) \cdot e^{-\frac{\varrho}{t}} \cdot \varrho^{\beta+1} \cdot d\varrho = \frac{2^\alpha\, t^{2+\alpha+\beta}\,(1+\alpha+\beta)!}{e^{2t}\,(2\alpha)!}\, F(\alpha-\beta-1,\ 2\alpha+1,\ 2t) \qquad (21)$$

wo die oberen Werte für das Lösungssystem I der Diracgleichungen, die unteren für das System II gelten [1].

Wie der große Abschirmungseinfluß später erkennen läßt, ist es mehr als ausreichend, wenn bei der Auswertung der Integrale K, O die ersten beiden Glieder der Entwickelung nach $\varepsilon = (\alpha Z)^2$ berücksichtigt werden. Der Einfachheit wegen sei diese Entwickelung bereits auf die kontinuierliche Eigenfunktion (17) angewandt; dann stellen sich die Ausdrücke K_I und O_I folgendermaßen dar:

$$\left.\begin{aligned} K_I &= \\ O_I &= \end{aligned}\right\} N_0 \begin{cases} -U_{\gamma_0} - \frac{\xi}{2}(1+\xi)V_{\gamma_0} + k\left[(1-\xi-\xi^2)U_{\gamma_0} + \xi V_{\gamma_0}\right] - k^2\left[(1+\frac{1}{2}\xi-\xi^2)U_{\gamma_0} + \frac{1}{3}U_{\gamma_0+1} - \xi^2 V_{\gamma_0} - \frac{1}{3}(1+\xi)V_{\gamma_0+1} - \frac{1}{3}V_{\gamma_0+2}\right] \\ \sqrt{2}\cdot\sqrt{\frac{1-\gamma_0}{1+\gamma_0}}\left\{V_{\gamma_0} - k(1-\xi)V_{\gamma_0} + k^2\left[\frac{1}{2}(1+\frac{2}{3}\varepsilon)U_{\gamma_0} + \frac{1}{6}U_{\gamma_0+1} - \frac{\xi}{3}V_{\gamma_0} - \frac{1}{3}(1-\xi)V_{\gamma_0+1}\right]\right\} \end{cases}$$

---

1) K. Seiler, a.a.O. Formel (2, 12) bzw. (2, 9).
2) Whittaker-Watson, A Course of Modern Analysis, Cambridge 1927, S. 394.

mit den für $\alpha = z_0$ resultierenden Integralwerten nach (21):

$$\left.\begin{aligned} U_{z_0} &= \\ U_{z_0+1} &= \\ V_{z_0} &= \\ V_{z_0+1} &= \\ V_{z_0+2} &= \end{aligned}\right\} \frac{2^3}{e^2} \left\{\begin{aligned} 4z &= \\ 4(2z^2+z-1) &= \\ (2z-1) &= \\ 2(2z^2-z-1) &= \\ 2(4z^3-7z-1) &= \end{aligned}\right\} \frac{2}{e^2} \left\{\begin{aligned} &4(1-0{,}85\varepsilon+0{,}02\varepsilon^2) \\ &8(1-1{,}60\varepsilon+0{,}34\varepsilon^2) \\ &(1-1{,}35\varepsilon) \\ &-3\varepsilon(1-0{,}43\varepsilon) \\ &-8(1+0{,}28\varepsilon-0{,}84\varepsilon^2) \end{aligned}\right.$$

Einsetzen dieser Werte ergibt zunächst:

$$\left.\begin{aligned} K_I &= \\ Q_I &= \end{aligned}\right\} \frac{2^3}{e^2}\cdot N_0 \left\{\begin{aligned} &-(1-0{,}72\varepsilon-0{,}12\varepsilon^2)+k(1-0{,}97\varepsilon)-\tfrac{7}{8}k^2(1-0{,}49\varepsilon-0{,}07\varepsilon^2) \\ &\tfrac{\varepsilon}{8}\left[1-1{,}35\varepsilon-k(1-1{,}60\varepsilon)+\tfrac{14}{3}k^2(1-0{,}55\varepsilon)\right] \end{aligned}\right.$$

Schließlich erhält man folgende Entwickelung des Matrixelements (19) an der Kante:

$$|Z_I|^2 = \frac{1}{9}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^4\cdot\left[(1-1{,}72\varepsilon+0{,}56\varepsilon^2)+\tfrac{14}{3}k^2(1-1{,}35\varepsilon+0{,}14\varepsilon^2)\right] \qquad (22)$$

Um den relativistischen Einfluß hervortreten zu lassen, ist es zweckmäßig, statt (22) den Verlauf der durch (Rel./Unrel.- 1) definierten Korrektur des unrelativistischen Wertes in Abhängigkeit von k^2 zu betrachten. Vorläufig kennen wir hiervon nur den Kantenwert und die Tangentenrichtung der Kurve in ihm; denn aus (22) folgt:

$$\frac{|Z_I|^2_{Rel.}}{|Z_I|^2_{Unr.}} - 1 = -\varepsilon\left[1{,}72-0{,}56\varepsilon-\tfrac{14}{3}k^2(0{,}36-0{,}42\varepsilon)\right] \qquad (23)$$

Der weitere Verlauf wird sich in einem der späteren §§ ergeben (s. § 3).

Ganz ähnlich dem bisher behandelten Übergang nach $P\frac{1}{2}$ gestaltet sich die Berechnung des Matrixelements für den Übergang von der K-Schale nach $P\frac{3}{2}$, dem Term mit der entgegengesetzten Spinrichtung. Man erhält folgendes Ergebnis:

$$|Z_I|^2 = \frac{2}{9}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^4\left[1-0{,}49\varepsilon-0{,}11\varepsilon^2+\tfrac{14}{3}k^2(1-0{,}73\varepsilon-0{,}08\varepsilon^2)\right] \qquad (25)$$

Unmittelbar ergibt sich dann wie Gleichung (23) der Verlauf der relativistischen Korrektur:

$$-\varepsilon\left[0{,}49+0{,}11\varepsilon+\tfrac{14}{3}k^2(0{,}24-0{,}03\varepsilon)\right] \qquad (26)$$

Zusammenfassen der beiden Übergänge von der K-Schale nach den energetisch gleichen Stufen P1/2 und P3/2 liefert (Gleichung (22) und (25)):

$$|Z_K^P|^2 = \frac{1}{3}\cdot\left(\frac{4}{\varepsilon}\right)^4\cdot\left[1-0{,}90\varepsilon+0{,}12\varepsilon^2+\tfrac{1}{3}k^2(1-0{,}94\varepsilon-0{,}01\varepsilon^2)\right] \quad (27)$$ [1)]

Das bisher hergeleitete Matrixelement (3) ging aus dem allgemeinen (1) hervor durch Beschränkung auf die 0-te Näherung in der Entwickelung des Retardierungsfaktors. Wir gehen nun einen Schritt weiter, indem wir neben dem Dipolglied die der ersten Näherung entsprechenden Quadrupolglieder berücksichtigen, und gelangen dann zu der folgenden Darstellung:

$$\begin{aligned} |Z_{ns}|^2 &= |Z_{ns}^0|^2 + 2\Re\left(A_{ns}^0\, A_{ns}^{II\,*}\right) + |A_{ns}^I|^2 \\ \text{mit}\quad A_{ns}^0 &= ik_0 Z_{ns}^0 = \int \psi_n^*\alpha_z\psi_s\cdot d\tau \\ A_{ns}^I &= -i\int \psi_n^*\alpha_z\psi_s\cdot y\cdot d\tau \\ A_{ns}^{II} &= -\tfrac{1}{2}\int \psi_n^*\alpha_z\psi_s\cdot y^2\cdot d\tau, \end{aligned} \quad (28)$$

in welcher zwei Glieder bereits weggelassen sind, die aus Matrixelementen ohne einen gemeinsamen Übergang bestehen. Für jedes der drei Matrixelemente gelten nämlich andere Übergangsregeln; so kombinieren bei Z_{ns}, welches bisher $Z_{n,s}$ genannt wurde, nur Terme, deren Quantenzahlen sich folgendermaßen zueinander verhalten:

$$\Delta m = 0; \quad \Delta l = \pm 1,$$

und woraus die in diesem Paragraphen gerechneten beiden Übergänge als die allein möglichen folgen. Größer ist die Zahl der Kombinationsmöglichkeiten bei den beiden neu hinzutretenden Matrixelementen. So ergeben sich für A_{ns}^I mit den Auswahlregeln:

$$\Delta m = \pm 1; \quad \Delta l = 0, \pm 2$$

folgende Übergänge von der K-Schale nebst ihrer Darstellung durch Integrale über Radialeigenfunktionen, wenn man die Integration über ϑ, φ ausführt:

$$\begin{aligned} |A_{K\,0\,\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}}^I|^2 &= \frac{1}{9}\left[P+Q\right]^2_{\kappa_I=-1} \\ |A_{K\,2\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}}^I|^2 &= \frac{1}{6}\left|\tfrac{3}{5}P+Q\right|^2_{\kappa_I=2} \\ |A_{K\,2\,\frac{3}{2}\,-\frac{1}{2}}^I|^2 &= \frac{1}{18}\left|\tfrac{P}{5}-Q\right|^2_{\kappa_I=2} \\ |A_{K\,2\,\frac{5}{2}\,\frac{3}{2}}^I|^2 + |A_{K\,2\,\frac{5}{2}\,-\frac{1}{2}}^I|^2 &= \left|\tfrac{2}{5}P\right|^2_{\kappa_I=-3} \end{aligned} \quad (29)$$

$$\text{mit}\quad P = \int F\cdot g\cdot\varrho^3\cdot d\varrho; \quad Q = \int G\cdot f\cdot\varrho^3\cdot d\varrho$$

Anwendung der Entwickelung (17) oder (18), je nachdem Lösungssystem I oder II vorliegt, ergibt für die in (28) enthaltenen Integrale:

1) Für $\varepsilon = 0$ stimmt dieses Ergebnis bei entsprechender Umrechnung mit der Entwickelung in Kap. VI, § 5 des während der Korrektur dieser Arbeit erschienenen Bands 2 von A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien, Braunschweig (Vieweg) 1939 überein.

$$\left.\begin{matrix} P = \\ Q = \end{matrix}\right\}^{\kappa_I=-1:} \frac{4}{e^2}\cdot\sqrt{\varepsilon}\left\{\begin{matrix} -1-\frac{4}{3}k^2 \\ 1+\frac{4}{3}k^2 \end{matrix}\right.$$

$$\left.\begin{matrix} P = \\ Q = \end{matrix}\right\}^{\kappa_I=2} \frac{8}{e^2}\cdot\sqrt{\varepsilon}\left\{\begin{matrix} -(1-0{,}14\varepsilon)+2k(1-0{,}20\varepsilon)-\frac{11}{6}k^2(1-0{,}30\varepsilon) \\ 1-0{,}44\varepsilon-2k(1-0{,}50\varepsilon)+\frac{11}{6}k^2(1-0{,}44\varepsilon) \end{matrix}\right.$$

$$P = \overset{\kappa_I=-3:}{\frac{8}{e^2}\cdot\sqrt{\varepsilon}}\left\{1-0{,}28\varepsilon+\frac{5}{12}k-\frac{1}{6}k^2(1+2{,}20\varepsilon)\right\}$$

Wir setzen diese Werte ein und finden:

$$|a_k^{I\,0\,\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}}|^2 = 0+(\cdots)\varepsilon^2$$

$$\left.\begin{matrix} |a_k^{I\,2\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}}|^2 = \\ |a_k^{I\,2\,\frac{3}{2}\,-\frac{1}{2}}|^2 = \\ |a_k^{I\,2\,\frac{5}{2}}|^2 = \end{matrix}\right\} \left(\frac{4}{e}\right)^4\cdot\frac{\varepsilon}{150}\cdot\left\{\begin{matrix} 1-1{,}8\varepsilon-\frac{1}{3}k^2(1-6{,}1\varepsilon) \\ 3[1-0{,}78\varepsilon-\frac{1}{3}k^2(1-2{,}0\varepsilon)] \\ 6[1-0{,}55\varepsilon-\frac{1}{3}k^2(1+1{,}92\varepsilon)] \end{matrix}\right.$$

Zusammenfassend folgt:

$$\Sigma|a_k^I|^2 = \left(\frac{4}{e}\right)^4\cdot\frac{\varepsilon}{15}\left[1-0{,}74\varepsilon-\frac{1}{3}k^2(1-0{,}06\varepsilon)\right] \qquad (30)$$

Da das andere der beiden neuen Matrixelemente, $a^I_{ms_3}$, für das die Auswahlregeln gelten $\Delta m = 0, \pm 2$; $\Delta l = \pm 1, \pm 3$, zusammen mit a_{ns} als Faktor auftritt, geben nur die gemeinsamen Übergänge ein endliches Produkt; das sind die für a_{ns} bereits bekannten Kombinationen mit den beiden Zuständen der P-Terme. In a^{II}_{ns} treten Integrale auf der Form

$$P = \int F\cdot g\cdot\varrho^4 d\varrho, \quad Q = \int G\cdot f\cdot\varrho^4 d\varrho,$$

deren Werte für die beiden angegebenen Übergänge zunächst angeführt seien:

$K \rightarrow E/\frac{1}{2}$: $\kappa_I = 1$:

$$\left.\begin{matrix} P = \\ Q = \end{matrix}\right\} -\left(\frac{4}{e}\right)^2\cdot\sqrt{\varepsilon}\left\{\begin{matrix} 1-1{,}36\varepsilon-k(1-1{,}61\varepsilon)+\frac{13}{3}k^2(1-0{,}68\varepsilon) \\ \frac{3}{4}\varepsilon \quad -\frac{3}{4}\varepsilon k \quad -2k^2(1-1{,}36\varepsilon) \end{matrix}\right.$$

$K \rightarrow E/\frac{3}{2}$: $\kappa_I = -2$:

$$\left.\begin{matrix} P = \\ Q = \end{matrix}\right\} \left(\frac{4}{e}\right)^2\cdot\sqrt{\varepsilon}\left\{\begin{matrix} 1-0{,}52\varepsilon+\frac{5}{8}k+\frac{23}{6}k^2(1-0{,}33\varepsilon) \\ \frac{3}{2}(1-0{,}64\varepsilon)+\frac{3}{16}\varepsilon k+\frac{3}{4}k^2(1+0{,}11\varepsilon) \end{matrix}\right.$$

Wir setzen diese Integralwerte in die entsprechenden Matrixelemente nach Ausführung der Winkelintegration ein und finden:

$$\left.\begin{matrix} a_K^{I\times 1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ a_K^{I\times 1\frac{3}{2}\frac{1}{2}} \end{matrix}\right\} = \left(\tfrac{4}{e}\right)^2 \cdot i\cdot\sqrt{\varepsilon}\begin{cases} -\frac{1}{10}\left[1-0{,}11\varepsilon+k(1-0{,}36\varepsilon)+k^2(1+1{,}55\varepsilon)\right] \\ -\frac{3}{10}\sqrt{2}\left[1-0{,}56\varepsilon-\frac{5}{8}k+\frac{49}{18}k^2(1-0{,}30\varepsilon)\right] \end{cases}$$

$$\left.\begin{matrix} a_K^{0\,1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ a_K^{0\,1\frac{3}{2}\frac{1}{2}} \end{matrix}\right\} = \left(\tfrac{4}{e}\right)^2 \cdot i\cdot\sqrt{\varepsilon}\begin{cases} \frac{1}{6}\left[1-0{,}61\varepsilon-k(1-0{,}36\varepsilon)+\frac{4}{3}k^2(1-0{,}11\varepsilon)\right] \\ -\frac{\sqrt{2}}{6}\left[1+0{,}01\varepsilon+\frac{5}{3}k+\frac{5}{6}k^2(1-0{,}21\varepsilon)\right] \end{cases}$$

Für das nach (27) gebildete Produkt folgt:

$$\left.\begin{matrix} 2\Re\left(a^0 a^{I\times}\right)_K^{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ 2\Re\left(a^1 a^{I\times}\right)_K^{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}} \end{matrix}\right\} = \left(\tfrac{4}{e}\right)^4 \cdot\frac{\varepsilon}{30}\begin{cases} 1-0{,}71\varepsilon+\frac{4}{3}k^2(1+1{,}40\varepsilon) \\ -3\left[1-0{,}56\varepsilon+\frac{32}{9}k^2(1-0{,}41\varepsilon)\right] \end{cases}$$

Sämtliche Quadrupolglieder fassen wir nun zusammen:

$$\sum \text{Quadrupole} = \frac{1}{3}\cdot\left(\tfrac{4}{e}\right)^4\left[-0{,}05\varepsilon^2-\varepsilon k^2(1-0{,}62\varepsilon)\right] \qquad (31)$$

Die Korrektur des Dipolgliedes $|\mathfrak{D}|^2$ durch Berücksichtigung der um ε größenordnungsmäßig davon verschiedenen Quadrupolglieder ist jedoch nicht ausreichend für eine bis zu in ε quadratischen Gliedern gehende Näherung. Eine solche stellt erst dann das für die Absorption maßgebende Matrixelement in derselben Annäherung dar, wenn auch in der Entwickelung des Retardierungsfaktors das Glied der Ordnung ε^2, das Oktopolglied, berücksichtigt wird. Da dieses selbst nur in O-ter, d.h. unrelativistischer Näherung, eingeht, erhält man es leicht durch Entwickelung des von Fischer [1] in eleganter Weise hergeleiteten retardierten Matrixelements, wobei nur unrelativistische Eigenfunktionen verwandt wurden. Wir gehen dabei aus von:

$$\operatorname{arc\,tg}\left[\sqrt{2\beta}+\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(1+2\beta)\right]+\operatorname{arc\,tg}\left[\sqrt{2\beta}-\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(1+2\beta)\right]=\operatorname{arc\,tg}\frac{2\sqrt{2\beta}}{1-2\beta+\frac{\varepsilon}{4}(1+2\beta)^2}$$

$$\text{mit}\quad 2\beta = \frac{\nu}{\nu_0}-1 = |\mathfrak{k}|^2$$

Entwickelung des Arguments ergibt:

$$\frac{2\sqrt{2\beta}}{1-2\beta}\left(1-v+v^2\right) \qquad \text{mit}\quad v=\frac{\varepsilon}{4}\cdot\frac{(1+2\beta)^2}{1-2\beta}$$

Damit erhält man als Entwickelung der ganzen Funktion:

$$2\operatorname{arc\,tg}\sqrt{2\beta}-\frac{\varepsilon}{2}\sqrt{2\beta}+\frac{\varepsilon^2}{3}\cdot\sqrt{2\beta}\,(1-2\beta)$$

---

1) J. Fischer, Ann. d. Phys. (5) 8, S. 833, 1931.

Diese wiederum eingeführt, liefert:

$$e^{\sqrt{\frac{\nu_k}{\nu-\nu_k}}\left[-2arc\,tg(\cdots+\cdots)-2arc\,tg(\cdots-\cdots)\right]} = e^{-4n'arctg\frac{1}{n'}}\left[1+\varepsilon+\frac{\varepsilon^2}{4}(1+2\beta)\right]$$

Da ferner

$$\left[\left(1+\frac{hr}{2mc^2}\right)^2-\frac{v^2}{c^2}\right]^2 = 1+\varepsilon(1-2\beta)+\frac{3}{8}\varepsilon^2\left(1-\frac{4}{3}\beta+4\beta^2\right) \quad \text{ist,}$$

findet man als Entwickelung von Fischers Ausdruck nach ε:

$$|Z|^2_{Fischer} = |Z|^2_{Stobbe}\left[1+2\varepsilon\beta-\frac{\varepsilon^2}{8}(1+8\beta-20\beta^2)\right] \quad (32)$$

Wie zu erwarten ist, stimmt das bereits von Seiler [1] errechnete, in ε lineare Glied in dieser Näherung überein mit den in Gleichung (31) zusammengefassten Quadrupolgliedern. Der folgende Ausdruck der Ordnung ε^2 enthält den Einfluß des nächsten Gliedes der Entwickelung des Retardierungsfaktors, des Oktopolgliedes. Wir suchen jedoch nur die Entwickelung - entsprechend dem bisherigen Rechnungsgang - dieses Gliedes an der Kante bis k^2, welche folgendermaßen lautet:

$$\frac{1}{3}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^4\left[-\frac{\varepsilon^2}{8}+\frac{\varepsilon^2}{2}k^2\right] \quad (33)$$

Die Entwickelung des für die Absorption maßgebenden Matrixelements an der Kante bis in $(2\beta) = -k^2$ linearen Gliedern bei Berücksichtigung der zweiten Potenz in ε ergibt sich nun durch Kombination von Dipol- (27), Quadrupol- (31) und Oktopolglied (33) folgendermaßen:

$$|Z|^2 = \frac{1}{3}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^4\left[1-0{,}90\,\varepsilon-0{,}06\,\varepsilon^2+\frac{11}{3}k^2(1-1{,}21\,\varepsilon+0{,}30\,\varepsilon^2)\right] \quad (34)$$

§ 3. Der relativistische Einfluß in größeren Kantenabständen für die K-Schale als Grundzustand

Wie sich durch Vergleich des unrelativistischen Teils der Entwickelung (27) mit den Ergebnissen von Stobbe [2] ergab und wie in den späteren Schaubildern (Fig. 1 und 2) zu erkennen, ist der Konvergenzbereich der in den vorigen Paragraphen durchgeführten Entwickelung sehr klein. In größeren Abständen von der Kante ist daher die mühevolle strenge Rechnung der einzige Weg zur Bestimmung des relativistischen Einflusses. Da aber die Entwickelung nach ε hier keine Vereinfachung bewirkt, wie aus Seilers Formeln (3, 30) und (3, 31) hervorgeht, ist man auf die numerische Berechnung einzelner Punkte angewiesen; ähnlich dem von Roess bereits

1) K. Seiler, a.a.O., S. 369.
2) M. Stobbe, Ann. d. Phys. (5) 7, S. 661, 1930.

verwandten Verfahren [1]. Wir legen dabei folgende Darstellung der in (19) definierten Integrale über die Radialeigenfunktionen für die K-Schale als Ausgangsniveau zugrunde:

$$\left.\begin{matrix} K = \\ O = \end{matrix}\right\} N \begin{cases} U_x + U_y \\ \Theta(U_x - U_y) \end{cases} \tag{35}$$

wo $U_{x,y} = \frac{|\Gamma(z+n)|}{(2z)!} \cdot \int_0^\infty e^{-\varrho(k+\frac{1}{t})} \cdot \varrho^{1+z_0+z}(x,y) \cdot d\varrho$ ist

mit $N^2 = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{(1+z_0) \cdot 4^{z_0} \cdot (1+kn) \cdot e^{\pi k n}}{(2z_0)!} 4^z \cdot |k|^{2z-1}$; $\Theta^2 = \frac{(\kappa_0 - z_0)(1-kn)}{(\kappa_0 + z_0)(1+kn)}$

wie durch Vergleich mit Gleichungen (5) unmittelbar einzusehen.

Ausgehend von der Integraldarstellung der in X und Y enthaltenen hypergeometrischen Reihen [2]:

$$F(z-n, 2z+1, 2k\varrho) = \frac{(2z)!}{\Gamma(z-n)\Gamma(z+1+n)} \cdot \int_0^1 s^{z-n-1}(1-s)^{z+n} \cdot e^{2k\varrho \cdot s} \cdot ds$$

$$F(z+1-n, 2z+1, 2k\varrho) = \frac{(2z)!}{\Gamma(z+n)\Gamma(z+1-n)} \cdot \int_0^1 s^{z-n}(1-s)^{z+n-1} \cdot e^{2k\varrho \cdot s} \cdot ds$$

gelangt man nach:

$$\int_0^\infty e^{-A\varrho} \cdot \varrho^B \cdot d\varrho = \frac{B!}{A^{B+1}}; \qquad R(A) > 0.$$

wegen $A = 1 + k - 2ks$; $B = 1 + z_0 + z$;

zu:

$$\left.\begin{matrix} U_x = \\ U_y = \end{matrix}\right\} \frac{(z_0+z+1)!}{|\Gamma(n+z)|} \frac{t^{z_0+z+2}}{(1+tk)^{z_0+z+2}} \cdot \begin{cases} \frac{1-\kappa k}{k(z+n)} \int_0^1 s^{z-1-n} \cdot (1-s)^{z+n} \cdot (1-xs)^{-(z_0+z+2)} ds \\ \int_0^1 s^{z-n} \cdot (1-s)^{z-1+n} \cdot (1-xs)^{-(z_0+z+2)} \cdot ds \end{cases} \tag{36}$$

Durch Entwickelung nach x und Einführung des Eulerschen Integrals leitet man leicht folgenden Zusammenhang her:

$$\int_0^1 s^{\alpha-1}(1-s)^{\delta-\alpha-1}(1-xs)^{-\beta} \cdot ds = \frac{\Gamma(\alpha) \cdot \Gamma(\delta-\alpha)}{\Gamma(\delta)} F(\alpha, \beta, \delta, x) \tag{37}$$

Diesen oben eingeführt, ergibt das Resultat der Integration in der Form:

$$\left.\begin{matrix} U_x = \\ U_y = \end{matrix}\right\} \frac{(z_0+z+1)!}{(2z)!} \frac{|\Gamma(n+z)|}{(1+tk)^{z_0+z+2}} t^{z_0+z+2} \cdot \begin{cases} \frac{1-\kappa_0 k}{k} \cdot F(z-n, z_0+z+2, 2z+1, \frac{2kt}{1+kt}) \\ (z-n) \cdot F(z+1-n, z_0+z+2, 2z+1, \frac{2kt}{1+kt}) \end{cases}$$

1) Vgl das in der Einführung Gesagte
2) K. Seiler, a.a.O. S.346.

Wir gehen mittels der Beziehung:

$$F(\alpha,\beta;\delta;x) = (1-x)^{-\alpha}\cdot F\left(\alpha,\delta-\beta;\delta;\frac{x}{x-1}\right) \tag{38}$$

von den erhaltenen Reihen über zu den beiden neuen Reihen:

$$F\left(z-n,\ z-z_0-1;\ 2z+1;\ \frac{-2k}{1-k}\right)$$
$$F\left(z+1-n,\ z-z_0-1;\ 2z+1;\ \frac{-2k}{1-k}\right)$$

Für den Übergang nach P 1/2 ist nun $\varkappa = 1$ und damit $z = z_0$, so daß sich letztere Reihen auf einfache analytische Ausdrücke reduzieren. Wir legen daher daher der numerischen Auswertung folgende endgültige Darstellung zugrunde:

$$\left.\begin{aligned} U_x &= \\ U_y &= \end{aligned}\right\} h \begin{cases} \dfrac{1+\varkappa_0 k}{k}\left[1-(z_0-n)\dfrac{x}{2z_0+1}\right]\cdot v \\ (z_0-n)\left[1-(z_0+1-n)\dfrac{x}{2z_0+1}\right] \end{cases} \tag{39}$$

mit $h = \dfrac{(2z_0+1)!\,\Gamma(z_0+n)!}{(1-t^2k^2)^{z_0+1}}\,t^{2z_0+2}\cdot v^n$; $v = \dfrac{1-tk}{1+tk}$; $x = \dfrac{2tk}{tk-1}$; $t = 1$, $\varkappa_0 = -1$

Für die drei Kantenabstände $\beta = 0{,}2$; $\beta = 0{,}4$; $\beta = 0{,}605$ wurde das Matrixelement je für die Ordnungszahlen Z = 60 und Z = 92 sowie zum Vergleich die unrelativistische Näherung berechnet. Das mit der vierten Potenz der Ordnungszahl multiplizierte, unrelativistisch nur vom Kantenabstand abhängige Matrixelement ergab sich folgendermaßen:

Tabelle 1.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta=0{,}2$	$Z^4\lvert Z\rvert^2$	0,0908	0,0373	0,1494
	Δ	-2,05	-1,67	
$\beta=0{,}4$	$Z^4\lvert Z\rvert^2$	0,0302	0,0093	0,0576
	Δ	-2,49	-1,87	
$\beta=0{,}605$	$Z^4\lvert Z\rvert^2$	0,0116	0,0025	0,0262
	Δ	-2,91	-2,01	

Unter den relativistischen Werten des Matrixelements ist jeweils eine Größe Δ angeführt, welche sich durch Division der S.8 definierten Korrektur des unrelativistischen Ausdrucks durch ε ergibt. Figur 1, welche die Abhängigkeit dieser Größe vom Kantenabstand veranschaulicht, zeigt eine überraschend gute Übereinstim-

mung der durch numerische Rechnung gewonnenen Punkte mit der Entwickelung (23) an der Kante; in gewissem Gegensatz zu dem S.6 über ihren Konvergenzbereich Gesagten. Auf das etwas befremdliche Vorkommen eines Wendepunkts in der Kurve Z = 60 darf kein Gewicht gelegt werden; denn die geringe Abweichung der Tangente von der numerisch berechneten Kurve liegt wohl innerhalb der Rechengenauigkeit.

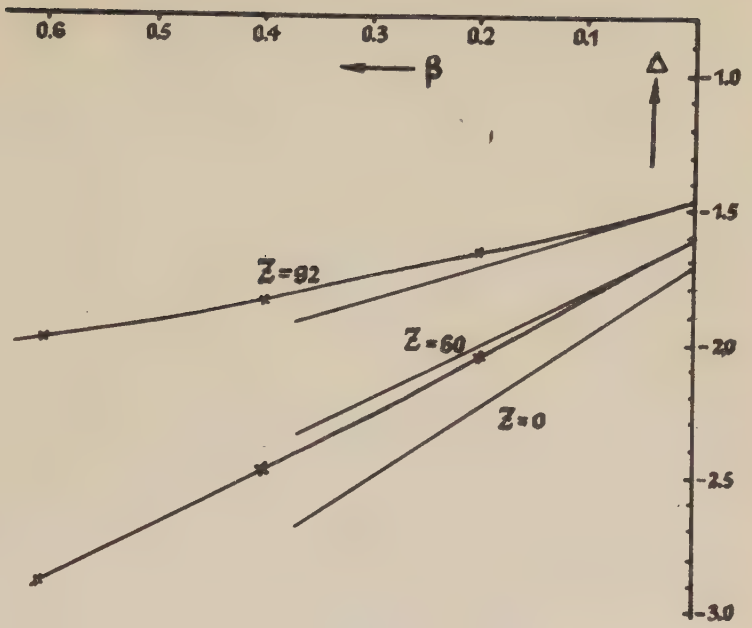


Fig. 1

Zur Berechnung des Matrixelements $|z_K^{\,p\,\frac{3}{2}}|^2$ leitet man mittels (37) und (38) aus Gleichung (36) die beiden neuen Integrale her:

$$\int_0^1 s^{\mathfrak{z}-n-1}\,(1-s)^{\mathfrak{z}+n}\,(1+xs)^{\mathfrak{z}_0+1-\mathfrak{z}}\cdot ds = \mathcal{J}$$

$$\int_0^1 s^{\mathfrak{z}-n}\,(1-s)^{\mathfrak{z}+n-1}\,(1-xs)^{\mathfrak{z}_0+1-\mathfrak{z}}\cdot ds$$

Für das zweite Integral ergibt Vertauschen von s mit (1-s):

$$v^{\mathfrak{z}_0+1-\mathfrak{z}}\cdot\bar{\mathcal{J}}$$

mit $$v = \frac{1-\kappa_0 k t}{1+\kappa_0 k t}$$

Damit gelangen wir zu der für die numerische Auswertung als am meisten geeigneten Darstellung:

$$\left.\begin{matrix} U_x = \\ U_y = \end{matrix}\right\} p \begin{cases} \dfrac{1-\kappa_{II} k}{k(\mathfrak{z}_{II}+n)}\,\mathcal{J} \\ v^{\mathfrak{z}_0+2-\mathfrak{z}_{II}}\,\bar{\mathcal{J}} \end{cases} \qquad (40a)$$

mit $$p = \frac{(\mathfrak{z}_0+\mathfrak{z}_{II}+1)!\; t^{\mathfrak{z}_0+\mathfrak{z}_{II}+2}}{(1+tk)^{\mathfrak{z}_0+\mathfrak{z}_{II}+2}\,|\Gamma(\mathfrak{z}_{II}+n)|}\cdot v^{\mathfrak{z}_{II}-n}\,; \quad \kappa_{II}=-2\,;\ t=1;\ v=\frac{1-tk\kappa_0}{1+tk\kappa_0};\ x=\frac{2tk}{tk-1}$$

$\kappa_0 = -1;$

Wir zerlegen:

$$\mathcal{J} = \frac{|\Gamma(\gamma_x+n)|^2}{(2\gamma_x)!}(\gamma_x+n) + \Delta\mathcal{J} \qquad (40b)$$

mit einem Integral von nur relativistischer Größenordnung:

$$\Delta\mathcal{J} = \int_0^1 s^{2\gamma_x-n-1}(1-s)^{2\gamma_x+n}\left[(1+xs)^{3+1-3\gamma_x}-1\right]\cdot ds$$

Zur Berechnung von ΔI wurden für 20 Zwischenpunkte Real- und Imaginärteil des Integranden aufgezeichnet und die Fläche unter den Kurven mittels der Simpsonschen Regel ermittelt. Wegen

$$\left(\frac{1-s}{s}\right)^n = e^{i\,|n|\,\ln\frac{s}{1-s}}$$

schwanken zwar die Werte des Integranden mit Annäherung an die Grenzen sehr oft hin und her; gleichzeitig sinkt aber der Betrag auf 0 herab, so daß für die graphische Integration hierdurch keine Schwierigkeiten entstehen. Roess [1], der sich bereits mit der relativistischen Berechnung des Matrixelements beschäftigte, zog wie Verfasser die graphische Auswertung des Integranden der Reihenberechnung vor; unter Zugrundelegung jedoch einer anderen Integraldarstellung, die man erhält, wenn man in (37) die Exponenten α und β vertauscht.

Das in Tabelle 2 aufgeführte Ergebnis lehrt, daß der relativistische Einfluß auf den Übergang nach dem Zustand P 3/2 geringer ist als nach den in Tabelle 1 für P 1/2 angegebenen.

Tabelle 2.

Z =		60	92	Unrelat.
$\beta=0{,}2$	$Z^4\cdot\|Z\|^2$	0,2830	0,2646	0,2988
	Δ	-0,28	-0,25	
$\beta=0{,}4$	$Z^4\cdot\|Z\|^2$	0,1102	0,1032	0,1153
	Δ	-0,23	-0,23	
$\beta=0{,}605$	$Z^4\cdot\|Z\|^2$	0,0498	0,0470	0,0524
	Δ	-0,26	-0,23	

Auf ein Schaubild für diese Δ-Funktionen entsprechend Fig. 1 wurde verzichtet.

Beide Übergänge von der K-Schale sind nun nach (4) zusammenzufügen, so daß sich für das resultierende Matrixelement Tabelle 3 ergibt, wo auch die aus Gleichung (27) folgenden Kantenwerte angeführt sind.

1) L. C. Roess, a.a.O.

Tabelle 3.

	Z =	60	92	Unrelat.
$\beta = 0$	$Z^4\|Z\|^2$	1,300	0,970	1,563
	Δ	-0,88	-,85	
$\beta = 0{,}2$	$Z^4\|Z\|^2$	0,3738	0,3019	0,4482
	Δ	-0,87	-0,73	
$\beta = 0{,}4$	$Z^4\|Z\|^2$	0,1404	0,1125	0,1729
	Δ	-0,99	-0,78	
$\beta = 0{,}605$	$Z^4\|Z\|^2$	0,0614	0,0495	0,0786
	Δ	-1,14	-0,82	

Das in Figur 2 in denselben Koordinaten wie Fig. 1 veranschaulichte Ergebnis für den gemeinsamen relativistischen Einfluß der beiden Beiträge des Dipolgliedes sei nun ergänzt durch die höheren Glieder der Entwickelung des Retardierungsfaktors. Bis auf in ε lineare Glieder ist der Beitrag des Quadrupolgliedes, wie aus Gleichung (32) folgt, für den ganzen Verlauf bekannt. Dessen Berücksichtigung führt dazu, daß mit zunehmendem Kantenabstand der relativistische Einfluß zunächst verschwindet, um dann in entgegengesetztem Sinne sich auszuwirken; ein wenig plausibles Ergebnis dieser Näherungsstufe (gestrichelte Kurve). Die Retardierungs-

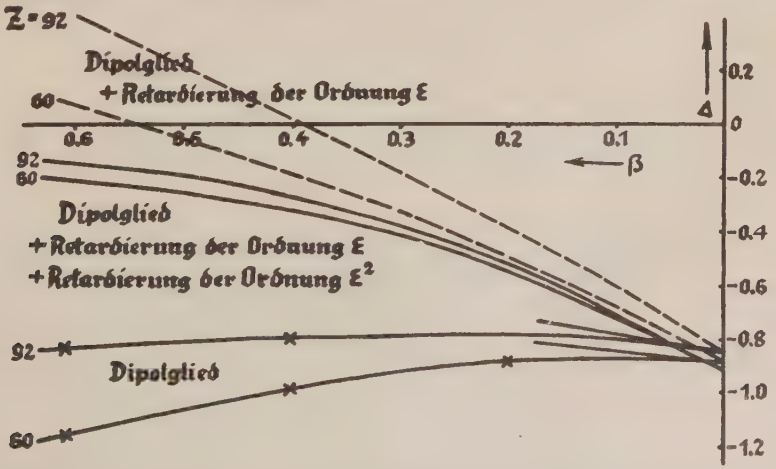


Fig. 2.

Glieder der Ordnung ε^2 setzen sich zusammen aus den Quadrupolgliedern von dieser Näherung und dem in Gleichung (32) enthaltenen Oktopolgliede. Wir begehen wohl keinen großen Fehler, wenn wir die in Gleichung (31) enthaltene Entwickelung der ersteren an der

Kante als für den weiteren Verlauf maßgebend betrachten und so den Einfluß der Retardierung bis Glieder der Ordnung ε^2 in der Darstellung der Fig. 2 berücksichtigen. Die sich dann ergebenden Kurven zeigen eine stetige Abnahme der Größe des relativistischen Effekts mit zunehmendem Kantenabstand, ein Ergebnis, das eher wohl einleuchtet [1].

Der von Roess gefundene relativistische Einfluß auf den Betrag seines Matrixelements ist verschieden von dem vom Verfasser für das Dipolglied erhaltenen Werte, was leicht zu der Behauptung führt, die Ergebnisse beider Autoren seien nicht im Einklang miteinander [2]. Nun wurden aber in dieser Arbeit Momentmatrizen zugrundegelegt, während R. mit Strommatrizen rechnet. In den auf S. 2 angegebenen Zusammenhang zwischen diesen beiden Darstellungen geht jedoch die Frequenz ein, auf die sich die Relativität gleichfalls auswirkt; und zwar erhält man durch Entwickelung des von Bethe angegebenen Ausdrucks [3] nach ε:

$$V = V_{unrel.}\left[1 + \frac{1-4\beta^2}{4(1+2\beta)}\cdot\varepsilon + \frac{1+8\beta^3}{8(1+2\beta)}\varepsilon^2\right] \qquad (41)$$

Zum Vergleich beider Matrixelemente bedarf es zunächst für jeden der beiden Übergänge der Anwendung der für die absoluten Beträge folgenden Beziehung

$$a_{ns}\,a^{*}_{sn} = \frac{4\pi^2}{c^2}\,\nu_{ns}^2\,|Z_{ns}|^2, \qquad (42)$$

um dann die beiden neuen Matrixelemente zu kombinieren. So wurde für den Betrag der Strommatrix folgende relativistische Korrektur erhalten und damit die Ergebnisse der Roesschen Arbeit verifiziert

Tabelle 4.

		0	0,2	0,4	0,605
für	Z = 60	-0,33	-0,53	-0,85	-1,19
	Z = 92	-0,24	-0,40	-0,59	-0,79

---

1) Anmerkung: Wir stellen fest, daß die einzelnen Glieder der Entwickelung nach ε sich alternierend verhalten. Das bedeutet jedoch nichts für den Einfluß der einzelnen Multipole. Zwar haben die Entwickelungsglieder des Retardierungsfaktors wechselndes Vorzeichen, wenn man die auf die einzelnen Multipole entfallenden betrachtet, da:

$$e^{i(\varphi'-\varphi)} = 1 + \left[i(\varphi'-\varphi) - \frac{(\varphi'-\varphi)^2}{2}\right] - \left[i\frac{(\varphi'-\varphi)^3}{3!} - \frac{(\varphi'-\varphi)^4}{4!}\right] + \cdots$$

Doch zeigt ein Vergleich von Gleichung (27), (31) und (33), daß der relativistische Einfluß von Dipol-, Quadrupol- und Oktopolglied sich eher im gleichen Sinne auswirkt.

2) Vgl. K. Seiler, a.a.O., S. 370, Anm. 4.

3) Bethe, Handb. d. Physik, 2.Aufl. Bd.24/1, S.316.

Wir wollen nun auf die bekannte empirische Darstellung des Absorptionskoeffizienten $\tau = C \cdot \lambda^n$ eingehen. Der von Seiler eingeführte, hier als Kennzeichen für den Abstand von der Kante gebrauchte Parameter β steht mit der Wellenlänge in folgendem Zusammenhang: 1)

$$\frac{\lambda_{Kante}}{\lambda} - 1 = \frac{2\beta}{1 + \frac{\beta}{4} + \frac{\beta^2}{9}} \qquad (44)$$

Gestaltet man nun die in § 2 durchgeführte Entwickelung nach k^2, die schematisch durch

$$|Z|^2 = |Z_K|^2 + \delta\left(\frac{r}{r_K} - 1\right)$$

bezeichnet sei, in eine solche nach $\log \lambda/\lambda_K$ um und faßt man in $\log |Z|^2$ die Größe λ/λ_K selbst als Funktion von $\log \lambda / \lambda_K$ auf und entwickelt nach der neuen unabhängigen Variabeln, so ergibt sich

$$\log |Z|^2 = \log |Z_K|^2 - \frac{\delta}{|Z_K|^2} \log \frac{\lambda}{\lambda_K}.$$

Daraus folgt für den in die empirische Formel (43) eingehenden Exponenten:

$$n = 1 - \frac{\delta}{|Z_K|^2}. \qquad (45)$$

Wie die logarithmische Darstellung der Fig. 3 zeigt, liegen die numerisch berechneten Punkte durchweg auf einer Geraden. In unserer Erwartung jedoch, die Entwickelung an der Kante werde, übereinstimmend mit dem Experiment, den weiteren Verlauf ergeben, sind wir getäuscht. Vielmehr gelangt man zu der Feststellung, daß mit Annäherung an die Kante die einzelnen Geraden nach unten umbiegen, so daß unsere Entwickelung einen zu flachen Anstieg ergibt. Aus Gleichungen (27) und (44) erhält man für den Anstieg an der Kante:

$$n = 1 + 11 \cdot \left(\frac{e}{4}\right)^4 (1 + 0{,}21\varepsilon - 0{,}04\,\varepsilon^2)$$

Berücksichtigt man nun, von Gleichung (34) ausgehend noch die Retardierung, so wird der Verlauf an der Kante noch flacher. Man darf vielleicht annehmen, daß der Retardierungseffekt auf den kantenferneren, linearen Teil von gleichem Einfluß ist und daher hier die Neigung um denselben Winkelbetrag korrigieren (gestrichelt).

Weit mehr tritt die Abweichung vom linearen Verlauf an der Kante in Evidenz, wenn man $\log |Z|_R^2 / |Z|_U^2$ gegen $\log \lambda / \lambda_K$ aufzeichnet mit der entsprechenden Entwickelung:

$$\log \frac{|Z|_R^2}{|Z|_U^2} = \log (1 + \varepsilon\Delta) = \log \frac{|Z_K|_R^2}{|Z_K|_U^2} + \left(\frac{\delta_R}{|Z_K|_R^2} - \frac{\delta_U}{|Z_K|_U^2}\right) \log \frac{\lambda}{\lambda_K},$$

welche Darstellung jedoch die rechnerischen Ergebnisse nur auf andere Weise illustrieren kann.

---

1) Von der Definitionsgleichung (3, 5) in Seilers Arbeit subtrahiere man die relativistische Energie der K-Schale und berücksichtige die Frequenzbedingung.

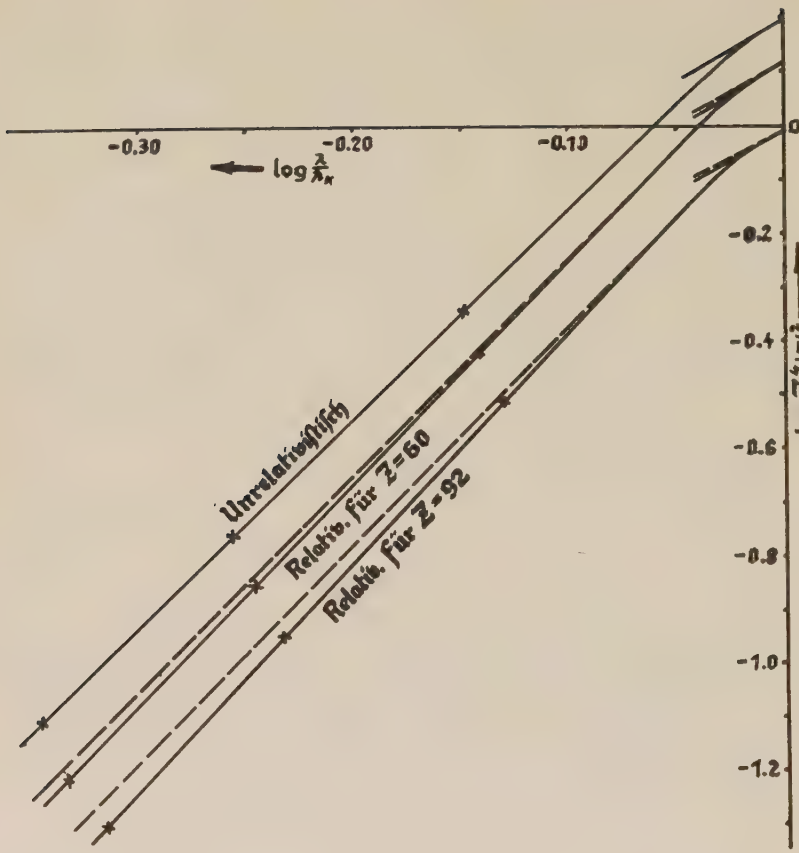


Fig. 3.

§ 4. Einfluß der inneren und äußeren Abschirmung

Unseren Rechnungen lag die Voraussetzung zugrunde, daß das herausgegriffene Elektron sich in einem Coulombpotential befindet. Das wirkliche Potential ist aber ein viel komplizierteres. Wir beschreiben es mit einer gemäß unserem rohen Atommodell (vgl. Einführung) ausreichenden Annäherung durch ein Coulombpotential mit durch die inneren Elektronen abgeschirmter Kernladung und durch die äußeren Elektronen modifiziertem Potential im Außenraum. Erst die Einführung zweier Abschirmungszahlen zusammen mit der Berücksichtigung des relativistischen Einflusses, wie in Seilers Dissertation verfahren [1], gibt die experimentellen Ergebnisse befriedigend wieder. Dort erfolgte die Bestimmung der äußeren Abschirmung so, daß im Bereiche der K-Schale möglichst gute Übereinstimmung de linearen Ersatzpotentials mit dem Fermipotential herrscht. Wir le

1) K. Seiler, a.a.O., S. 358.

gen dagegen hier die von Hönl [1] experimentell aus der Ionisierungsspannung hergeleiteten Werte der äußeren Abschirmung zugrunde, die auch die Kantenfrequenzen recht gut darstellen. Führen wir daher das durch Abschirmung modifizierte Coulombpotential

$$-\frac{(Z-s)^2}{r}+V_0$$

ein, dann wird die Energie der K-Schale:

$$E_n - E_s = -\frac{(Z-s)^2}{2}\left(1+\frac{\xi}{4}+\frac{\xi^2}{8}\right)+V_0 \quad \text{at. E.}$$

Da wegen der Abstoßung der äußeren Elektronen dort, wo das herausgegriffene Elektron den Atomverband im Coulombpotential mit der Geschwindigkeit Null verläßt, dasselbe bereits mit endlicher Geschwindigkeit austritt, beträgt die Energie des kontinuierlichen Zustands:

$$E_s - E_0 = (Z-s)^2\beta - V_0.$$

Kombination beider Beziehungen ergibt unter Heranziehung der Frequenzbedingung:

$$\frac{\lambda_K}{\lambda} - 1 = \frac{2\beta - \frac{2V_0}{(Z-s)^2}}{1+\frac{\xi}{4}+\frac{\xi^2}{8}-\frac{2V_0}{(Z-s)^2}} \qquad (46)$$

Hiernach entsprechen den Werten des Kantenabstandsparameters β, mit denen in § 2 und 3 gerechnet wurde, die in Tab. 5 angeführten und in Fig. 4 veranschaulichten Verhältnisse von λ / λ_K, wo der ohne Abschirmung unrelativistisch und relativistisch resultierende Verlauf gestrichelt eingezeichnet ist.

Tabelle 5.

Z	$2V_0$ (at)	λ/λ_K f. $\beta = 0{,}2$	λ/λ_K f. $\beta = 0{,}4$	λ/λ_K f. $\beta = 0{,}605$
14	48,9	0,775	0,472	0,336
24	122,3	0,758	0,496	0,365
42	291,8	0,748	0,521	0,398
60	492,4	0,747	0,540	0,420
74	703,0	0,753	0,551	0,4325
92	945,2	0,760	0,570	0,454

Auffallend, aber in den Hönlschen Abschirmungswerten begründet, ist das Verhalten der Kurve für $\beta = 0{,}2$ im Vergleich mit den beiden andern Kurven.

Ebenso wie auf die Lage der Frequenzen, so übt der Abschirmungseffekt auch auf die Größe des Matrixelements und damit auf den Absorptionskoeffizienten einen wesentlichen Einfluß aus. Wir nehmen ferner an, daß der prozentuale Anteil der Relativitätskor-

---

1) H. Hönl, Ztschr. f. Phys. 84, S. 1, 1933.

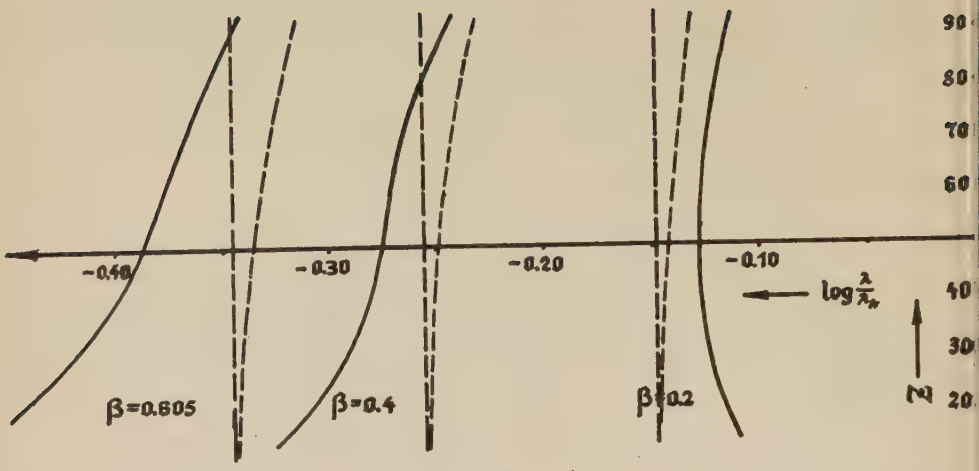


Fig. 4.

rektur mit und ohne Abschirmung derselbe ist, was zu folgendem Ergebnis führt (vgl. Seiler, Diss. S. 362):

$$\tau_a = \frac{16 \cdot \pi^3 \cdot e^2}{\lambda} |Z|^2$$

$$|Z|^2 = \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{4}{2}\right)^4 \cdot \left(\frac{n^2}{1+n^2}\right)^5 \cdot e^{-4n \operatorname{arctg} \frac{1}{n}} \cdot (1 + \text{Rel. Korr.}) \qquad (47)$$

mit $$\frac{1}{n} = \beta - \frac{V_0}{(Z-s)^2}$$

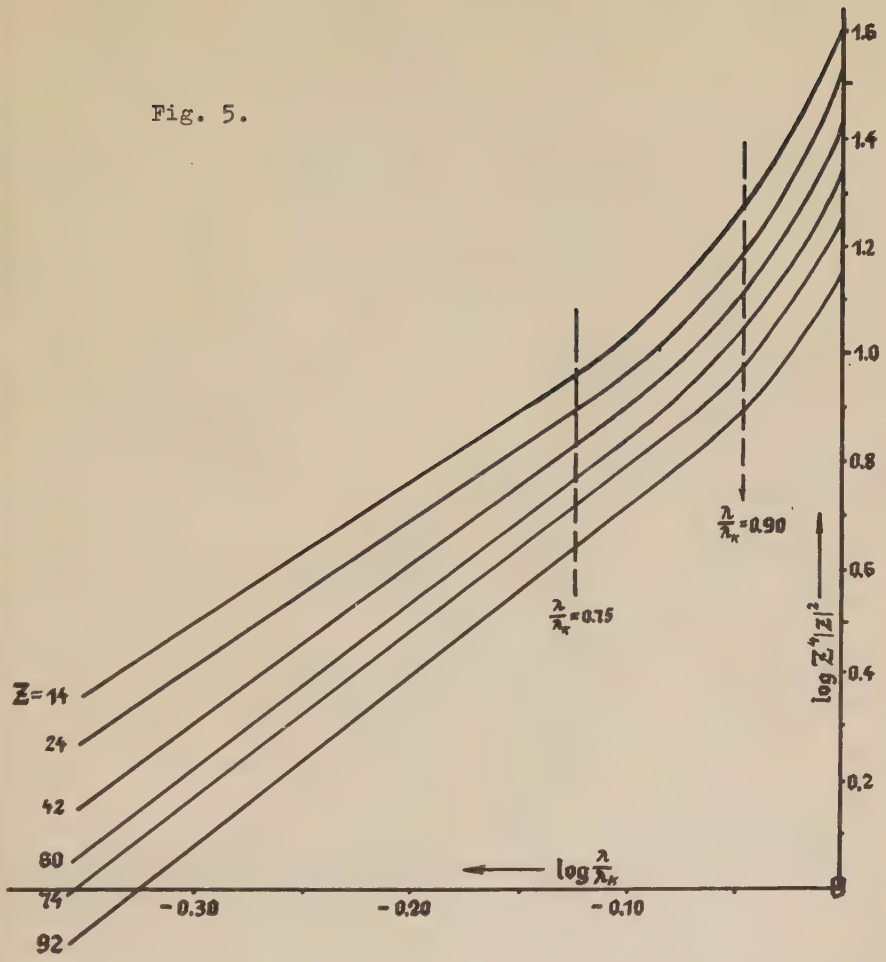
Trägt man, wie früher geschehen, das Matrixelement $Z^4 \cdot |Z|^2$, aber nach Fig. 2 durch den Einfluß von Dipolglied und Retardierung korrigiert und nun auch durch Abschirmungswirkung abgeändert, als Funktion der Wellenlänge logarithmisch auf, so ergeben die in Fig. 5 dargestellten Werte der Tabelle 6 (ähnlich wie Fig. 3) in großer Entfernung von der Kante einen geradlinigen Verlauf. Mit Annäherung an die Kante aber biegen die Geraden, umgekehrt wie bei Fig. 3, nach oben um.

Tabelle 6.

$Z^4 |Z|^2$

Z	Kante	$\beta = 0{,}2$	$\beta = 0{,}4$	$\beta = 0{,}605$
14	43,0	9,05	2,95	1,16
24	34,6	7,80	2,64	1,09
42	26,1	6,46	2,305	1,00
60	20,8	5,56	2,11	0,950
74	17,85	5,12	1,98	0,922
92	13,40	4,38	1,79	0,874

Fig. 5.



§ 5. Entwickelung an der Kante und numerische Berechnung einzelner Punkte für die Übergänge von der L_I-Schale

Da die L_I-Schale mit dem K-Niveau alle Quantenzahlen mit Ausnahme der radialen Quantenzahl gemeinsam hat, ist der Zusammenhang des Matrixelements $|z|^2$ mit den Integralen K,O über die Radialeigenfunktionen derselbe wie Gl. (19) bzw. (24). Wir schreiben die Radialeigenfunktion des L_I-Terms folgendermaßen:

$$\left.\begin{matrix} G = \\ F = \end{matrix}\right\} N_0 \begin{cases} e^{-\frac{\varrho}{N}} \cdot \varrho^{\lambda_0 - 1} \cdot (1 - w \cdot \varrho) \\ k e^{-\frac{\varrho}{N}} \cdot \varrho^{\lambda_0 - 1} \cdot \left(1 + \frac{\lambda}{N} - w \cdot \varrho\right) \end{cases} \tag{48}$$

mit $N = \sqrt{2(1+z_0)}$; $k^2 = \frac{3N-2z_0-4}{N+2z_0}$; $w = \frac{1+N}{(1+z_0)(1+2z_0)}$

$$N_0^2 = \frac{(N+2z_0)\cdot 4^{z_0-1}\cdot Z^3}{(2z_0)!\,N^{2z_0}}$$

Wir leiten zunächst die Entwickelung an der Kante her und wenden daher Formel (17) auf den Term P 1/2 mit $\kappa_I = 1$, $z_I = z_0$ an. Die übliche Entwickelung nach ε ergibt dann den durch das Auftreten von 7 Integralen umfangreicheren Ausdruck:

$$\left.\begin{matrix} K_I = \\ O_I = \end{matrix}\right\} N \left\{\begin{matrix} \left[-U_{z_0} + \tfrac{1}{2}(1+\tfrac{\varepsilon}{2})U_{z_0+1} - \tfrac{\varepsilon}{2}(V_{z_0} - \tfrac{1}{2}V_{z_0+1})\right](1-k) + \tfrac{\varepsilon}{8}k\,U_{z_0+1} - k^2\left[U_{z_0} - \tfrac{1}{6}(1+\tfrac{7}{4}\varepsilon)U_{z_0+} \right. \\ \left. - \tfrac{1}{6}(1+\tfrac{\varepsilon}{2})U_{z_0+2} - \tfrac{2}{3}(1+\varepsilon)V_{z_0+1} + \tfrac{\varepsilon}{2}V_{z_0+2} + \tfrac{1}{6}(1+\tfrac{\varepsilon}{2})V_{z_0} \right. \\ \sqrt{\varepsilon}\,k\left\{(2V_{z_0} - \tfrac{1}{2}V_{z_0+1})(1-k) + k^2\left[U_{z_0} + \tfrac{1}{12}U_{z_0+1} - \tfrac{1}{12}U_{z_0+2} - \tfrac{2}{3}V_{z_0+1} + \tfrac{1}{6}V_{z_0+2}\right]\right\} \end{matrix}\right.$$

Einführen der Integralwerte (21) mit $t = N$, $\alpha = z_0$

$$\left.\begin{matrix} U_{z_0} = \\ U_{z_0+1} = \\ U_{z_0+2} = \\ V_{z_0} = \\ V_{z_0+1} = \\ V_{z_0+2} = \\ V_{z_0+3} = \end{matrix}\right\} \left(\frac{2}{e}\right)^4 \left\{\begin{matrix} -4\varepsilon \\ -64\,(1-1{,}29\,\varepsilon) \\ -512(1-1{,}86\,\varepsilon) \\ -2 \\ -16\,(1-1{,}42\,\varepsilon) \\ -32 \\ 640 \end{matrix}\right.$$

liefert bis auf Glieder der Ordnung ε^2:

$$|Z_I| = \frac{2}{9}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1 - 0{,}85\varepsilon + 0{,}28\varepsilon^2 + \frac{37}{3}k^2(1-0{,}98\varepsilon+0{,}37\varepsilon^2)\right] \quad (49$$

Für den Übergang nach P 3/2 ergibt eine entsprechende Rechnung:

$$|Z_k^{P\frac{3}{2}}|^2 = \frac{4}{9}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\left[1 - 0{,}80\,\varepsilon - 0{,}04\varepsilon^2 + \frac{37}{3}k^2(1-1{,}26\varepsilon+0{,}16\varepsilon^2)\right] \quad (50$$

Kombination beider Übergänge ergibt als Entwickelung des Dipolgl des an der Kante:

$$|Z|^2_{Dipol} = \frac{2}{3}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1 - 0{,}82\varepsilon + 0{,}07\varepsilon^2 + \frac{37}{3}k^2(1-1{,}17\varepsilon+0{,}23\varepsilon^2)\right] \quad (51$$

Es seien nun kurz die Ergebnisse für die Quadrupolglieder gegeben, die ebenso wie Gleichung (29) für die K-Schale mit Integ len über die Radialeigenfunktionen zusammenhängen:

$$\left.\begin{aligned} |a_{L_I}^{I\,2\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}|^2 &= \\ |a_{L_I}^{I\,2\,\frac{3}{2}\,-\frac{1}{2}}|^2 &= \\ |a_{L_I}^{I\,2\,\frac{1}{2}}|^2 &= \end{aligned}\right\} (\tfrac{4}{e})^8 \cdot \varepsilon \begin{cases} 0{,}03\,\varepsilon k^2 \\ 0{,}10\,\varepsilon k^2 \\ 0{,}31\,\varepsilon k^2 \end{cases}$$

$$\sum |a_{L_I}^{I}|^2 = (\tfrac{4}{e})^8 \cdot \varepsilon \cdot 0{,}43\,\varepsilon k^2$$

Ferner ist nach dem auf S. 11 angeführten Zusammenhang mit den Integralen P, Q:

$$\left.\begin{aligned} a_{L_I}^{I\,1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}} &= \\ a_{L_I}^{I\,1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}} &= \end{aligned}\right\} -(\tfrac{4}{e})^4 \cdot \tfrac{i}{10} \cdot \sqrt{\varepsilon} \begin{cases} \sqrt{2}\,[1+0{,}02\varepsilon + k(1-0{,}23\varepsilon) + \tfrac{4}{3}k^2(1+2{,}19\varepsilon)] \\ 3\,[1-0{,}15\,\varepsilon - \tfrac{5}{8}k + \tfrac{175}{18}k^2(1-0{,}45\,\varepsilon)] \end{cases}$$

$$\left.\begin{aligned} a_{L_I}^{o\,1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}} &= \\ a_{L_I}^{o\,1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}} &= \end{aligned}\right\} (\tfrac{4}{e})^4 \cdot \tfrac{i}{24} \cdot \sqrt{\varepsilon} \begin{cases} \sqrt{2}\,[1-0{,}11\,\varepsilon - k(1-0{,}36\,\varepsilon) + \tfrac{3}{8}k^2(1-0{,}05\varepsilon)] \\ -2\,[1-0{,}09\,\varepsilon + \tfrac{5}{8}k + \tfrac{13}{6}k^2(1-0{,}84\varepsilon)] \end{cases}$$

Wir bilden gemäß Gleichung (28):

$$\left.\begin{aligned} 2\Re\,(a^{o}a^{I\,*})_{L_I}^{P\,\frac{1}{2}} &= \\ 2\Re\,(a^{o}a^{I\,*})_{L_I}^{P\,\frac{3}{2}} &= \end{aligned}\right\} (\tfrac{4}{e})^8 \cdot \tfrac{\varepsilon}{60} \begin{cases} 1-0{,}09\,\varepsilon + 3k^2(1+1{,}10\,\varepsilon) \\ -3\,[1-0{,}24\,\varepsilon + \tfrac{107}{9}k^2(1-0{,}62\,\varepsilon)] \end{cases}$$

Ein Vergleich der sich zu

$$\tfrac{2}{3} \cdot (\tfrac{4}{e})^8 \cdot \left[-\tfrac{\varepsilon}{20}(1-0{,}31\varepsilon) - \tfrac{49}{60}\varepsilon k^2(1-1{,}58\,\varepsilon)\right] \qquad (52)$$

ergebenden Summe der Quadrupolglieder mit dem Dipolgliede Gl. (51) führt zu der Feststellung, daß der Einfluß der ersteren um das Drei- bis Vierfache geringer ist wie bei der K-Schale (vgl. Gl. (31) und (27)). Einen entsprechend kleineren Beitrag wird wohl auch das Oktopolglied liefern, wir wollen daher von der Retardierung ganz absehen, was die Gültigkeit der nachfolgenden Ergebnisse für größere β-Werte zweifelhaft macht [1].

Wie die eben behandelte Entwickelung, so gestaltet sich auch die numerische Berechnung einzelner kantenferner Punkte, worauf

---

1) Anmerkung: Zwar ist die Ausdehnung der L-Schale größer als die der K-Schale; aber im gleichen Verhältnis stehen auch die Wellenlängen zueinander (nämlich wie 1 : 2^2), so daß man von vornherein einen Retardierungseinfluß von ähnlichem Betrage wie bei der K-Schale zu erwarten hat.

nun eingegangen werden soll, komplizierter als bei der K-Schale. Nach Gleichung (46) findet man für die bekannten Integrale K, O den Ausdruck:

$$\left.\begin{matrix} K = \\ O = \end{matrix}\right\} N \begin{cases} U_x + U_y - w\,(V_x + V_y) \\ k\cdot\beta\,[(1+\frac{2}{N})(U_x - U_y) - w\,(V_x - V_y)] \end{cases}$$

mit $U_{x,\,y}$ nach Gl. (35) für $t = N$

und

$$V_{x,y} = \frac{|\Gamma(z+n)|}{(2z)!}\int_0^\infty e^{-\varrho(\frac{1}{N}+k)}\cdot\varrho^{2+z_0+z}\,(X,Y)\cdot d\varrho$$

$$N^2 = N_0^2\cdot e^{x/n/}\cdot(1+kn)\frac{4^{z-1}\,|k|^{2z-1}}{x};\quad \beta\cdot\sqrt{\frac{1-kn}{1+kn}}$$

Die S. 13/14 durchgeführten Rechenoperationen ergeben für den Übergang nach P 1/2 die Integrale U_x, U_y nach Gl. (39) mit $t = N$, κ_0, z_0, κ, z wie dort; die beiden hier neu auftretenden Integrale wie folgt:

$$\left.\begin{matrix} V_x = \\ V_y = \end{matrix}\right\} h \begin{cases} (2z_0+2)\frac{N}{1+kN} \begin{cases} \frac{1-k}{k}\;\frac{1-kN}{1+kN}\cdot F(-z, z_0-n;\, 2z_0+1;\, x) \\ (z_0-n)\qquad F(-z, z_0+1-n;\, 2z_0+1;\, x) \end{cases} \end{cases} \tag{53}$$

Aus Gl. (39) und (53) wurde für die Kantenabstände $\beta = 0{,}2$ und $0{,}4$ je für $Z = 60$ und $Z = 92$ das mit Z^4 multiplizierte Matrixelement wie folgt gefunden:

Tabelle 7.

	Z	60	92	Unrelat.
$\beta = 0{,}2$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,1742	0,1269	0,2201
	Δ	-1,08	-0,94	
$\beta = 0{,}4$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,02935	0,01723	0,04156
	Δ	-1,54	-1,30	

Der in Fig. 6 veranschaulichte Zusammenhang zwischen β und Δ zeigt, daß die in Gleichung (49) enthaltene Entwickelung nur ganz nahe der Kante konvergiert, was uns nach dem in Anmerkung S. 6 Gesagten auch nicht verwundert.

Der Berechnung des Übergangs nach P 3/2 legen wir die Darstellung von U_x und U_y nach Gleichung (40) mit $t = N$ zugrunde. Statt mit V_x und V_y ganz analog zu verfahren, ist es jedoch weniger mühevoll, folgende drei Integrale insgesamt numerisch auszuwerten:

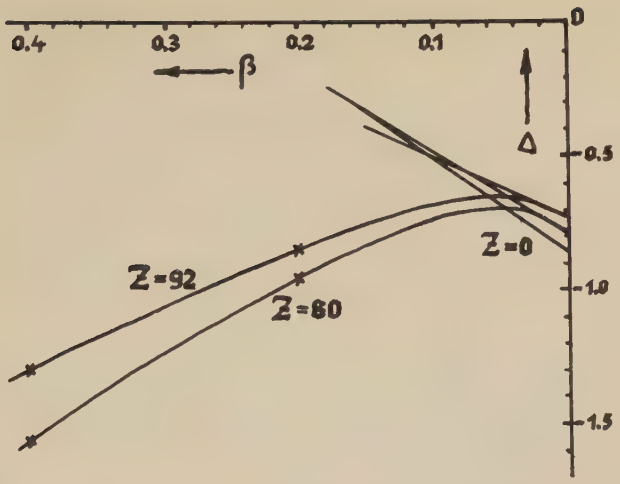


Fig. 6.

$$\mathcal{J} \equiv \mathcal{J}_1 = (\gamma_I + n)\frac{|\Gamma(\gamma_I+n)|^2}{(2\gamma_I)!} + \Delta\mathcal{J}_1; \quad \Delta\mathcal{J}_1 = \int_0^1 s^{\gamma_I - n - 1}(1-s)^{\gamma_I + n}$$

$$\mathcal{J}_2 = \frac{|\Gamma(\gamma_I+n+1)|^2}{(2\gamma_I+1)!} + \Delta\mathcal{J}_2; \quad \Delta\mathcal{J}_2 = \int_0^1 s^{\gamma_I - n}(1-s)^{\gamma_I + n}$$

$$\mathcal{J}_3 = (\gamma_I+n)(\gamma_I+n+1)\frac{|\Gamma(\gamma_I+n)|^2}{(2\gamma_I+1)!} + \Delta\mathcal{J}_3; \quad \Delta\mathcal{J}_3 = \int_0^1 s^{\gamma_I - n - 1}(1-s)^{\gamma_I + n + 1}$$

$$\left.\begin{array}{l}\\ \\ \\ \end{array}\right\} \left[(1+x)^{\gamma_0+1-\gamma_I} - 1\right] \qquad (54b)$$

Es folgt dann:

$$\left.\begin{array}{l} V_x = \\ V_y = \end{array}\right\} p \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{1+2k}{k(\gamma_I+n)} \left[\mathcal{J}_1 + x\mathcal{J}_2\right] \\ v^{\gamma_0+2-\gamma_I}\left[\bar{\mathcal{J}}_1 + x\bar{\mathcal{J}}_3\right] \end{array}\right. \qquad (54a)$$

mit $$x = \frac{2kN}{1-kN}; \quad p = \frac{(\gamma_0+\gamma_I+2)!}{(1+kN)^{\gamma_0+\gamma_I+3}}\frac{N^{\gamma_0+\gamma_I+3}}{|\Gamma(\gamma_I+n)|} \cdot v^{\gamma_I - n}; \quad v = \frac{1+kN}{1-kN}$$

So wurden für den Übergang nach P 3/2 folgende Werte des Matrixelements erhalten:

Tabelle 8.

	Z	60	92	Unrelat.
$\beta = 0{,}2$	$Z^4\|Z\|^2$	0,4314	0,4499	0,4401
	Δ	-0,10	-0,05	
$\beta = 0{,}4$	$Z^4\|Z\|^2$	0,0871	0,0974	0,0831
	Δ	+0,25	+0,38	

Wir fassen beide Übergänge zusammen und finden:

Tabelle 9.

Z	60	92	Unrelat.
$\beta = 0 \quad \Delta =$	-0,80	-0,78	--
$\beta = 0{,}2 \quad \Delta =$	-0,43	-0,28	--
$\beta = 0{,}4 \quad \Delta =$	-0,37	-0,18	--

Mit zunehmendem Abstand von der Kante wird also der relativistische Einfluß, absolut genommen, geringer; ebenso wie für die K-Schale festgestellt wurde. Die Entwickelung der Quadrupolglieder der Gleichung (52) weist ferner darauf hin, daß durch die Retardierungsglieder dieses Angleichen an den unrelativistischen Wert noch verstärkt wird.

Wie bei der K-Schale, so ergibt die doppelt logarithmische Darstellung der Ergebnisse auch hier einen völlig linearen Verlauf bis auf die Nähe der Kante, wo die Neigung sich verringert.

§ 6. Anwendung des gleichen Rechnungsverfahrens auf die Übergänge von der L_{II}-Schale

Von der L_{II}-Schale mit den Diracschen Eigenfunktionen

$$\psi^{x}_{L,1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{cases} -iFY_{00} \\ 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\,GY_{10} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\,GY^{x}_{11} \end{cases}$$

finden Übergänge sowohl nach der S- wie nach der D-Terme statt, und zwar gemäß den Auswahlregeln nach:

$$\psi_{E0\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{3}}\,if\,Y_{10} \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\,if\,Y_{11} \\ gY_{00} \\ 0 \end{cases} \qquad \psi_{E2\frac{3}{2}\frac{1}{2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{3}}\,if\,Y_{10} \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}\,if\,Y_{11} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\,gY_{20} \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\,gY_{21} \end{cases}$$

Unser Matrixelement stellt sich nach Integration über die azimutalen Eigenfunktionen folgendermaßen durch Integrale über die Radialeigenfunktionen dar:

$$|Z_{L_I}^{S\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}|^2 = \frac{1}{9}\,|K+O|^2_{\kappa_I=-1}$$
$$|Z_{L_I}^{P\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}|^2 = \frac{2}{9}\,|K+O|^2_{\kappa_I=2} \qquad (55)$$

Diese heißen:

$$\left.\begin{matrix} G = \\ F = \end{matrix}\right\} N_0 \begin{cases} e^{-\frac{\varrho}{N}}\cdot\varrho^{z_0-1}\left[1-\frac{2}{N}+w\varrho\right] \\ k\,(1+w\varrho)\,e^{-\frac{\varrho}{N}}\cdot\varrho^{z_0-1} \end{cases} \qquad (56)$$

mit $N_0^2 = \frac{(3N+2z_0+4)\cdot 4^{z_0-1}}{(2z_0)!\;N^{2z_0}}\cdot Z^3$; $\quad N = \sqrt{2\,(1+z_0)}$;

$$w = \frac{1-N}{(1+z_0)(1+2z_0)}\,; \qquad k^2 = \frac{N-2z_0}{3N+2z_0+4}\,.$$

In der Entwickelung an der Kante treten dieselben V-Integrale auf wie bei den entsprechenden Rechnungen für die L_I-Schale; dagegen für den Übergang nach S 1/2 mit $\kappa_I = -1$, $\alpha = z_0 = \sqrt{1-\varepsilon}$ die neuen U-Integrale:

$$\left.\begin{matrix} U_{z_0} = \\ U_{z_0+1} = \\ U_{z_0+2} = \end{matrix}\right\} \left(\frac{2}{e}\right)^4 \begin{cases} -4 \\ 32\,(1-0{,}66\,\varepsilon) \\ 448 \end{cases}$$

Das Ergebnis ist:

$$|Z_I|^2 = \frac{1}{9\cdot 6}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1-0{,}39\varepsilon+0{,}09\varepsilon^2+\frac{49}{3}k^2(1-0{,}77\varepsilon+0{,}20\varepsilon^2)\right] \qquad (57)$$

Für den Übergang nach den D-Term mit $\kappa_I = 2$, $\alpha = \sqrt{4-\varepsilon}$:

$$|Z_I|^2 = \frac{16}{27}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\left[1-0{,}17\varepsilon+0{,}05\varepsilon^2+\frac{49}{3}k^2(1-0{,}56\varepsilon+0{,}01\varepsilon^2)\right] \qquad (58)$$

Gleichung (57) und (58) kombiniert liefert:

$$|Z|^2_{Dipol} = \frac{11}{18}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\left[1-0{,}18\varepsilon+0{,}05\varepsilon^2+\frac{8\cdot 67}{33}k^2(1-0{,}56\varepsilon+0{,}01\varepsilon^2)\right] \qquad (59)$$

Es seien nun kurz die Quadrupolglieder angeführt:

$$|\alpha_{L_I}^{I\,1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}|^2 = \frac{1}{9}\,|P+Q|^2_{\kappa_I=1}$$
$$|\alpha_{L_I}^{I\,1\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}|^2 = \frac{1}{6}\,|P+\tfrac{3}{5}Q|^2_{\kappa_I=-2} =$$
$$|\alpha_{L_I}^{I\,1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}|^2 = \frac{1}{18}\,|P-\tfrac{6}{5}Q|^2_{\kappa_I=-2} = \Bigg\} \frac{\varepsilon}{12\cdot 75}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8 \begin{cases} 1+\frac{37}{3}k^2 \\ 3\left(1+\frac{37}{3}k^2\right) \\ 36\left(1+\frac{22}{3}k^2\right) \end{cases}$$
$$|\alpha_{L_I}^{I\,3\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}|^2 + |\alpha_{L_I}^{I\,3\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}|^2 = |\tfrac{2}{5}Q|^2_{\kappa_I=3} =$$

$$\sum|\alpha_{L_I}^{I}|^2 = \frac{\varepsilon}{9}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\left(1+\frac{113}{15}k^2\right)$$

$$\left.\begin{array}{l} 2\Re\,(\hat{a}\hat{a}^{I_x})^{S\frac{1}{2}}_{L_I} \\ 2\Re\,(\hat{a}\hat{a}^{I_x})^{D\frac{3}{2}}_{L_I} \end{array}\right\} \left(\frac{4}{e}\right)^8 \cdot \frac{\varepsilon}{135} \left\{\begin{array}{l} -\frac{1}{16}\left(7+\frac{244}{3}k^2\right) \\ 1-\frac{59}{3}k^2 \end{array}\right.$$

Sämtliche Glieder ergeben nun:

$$\Sigma\ \text{Quadrupole} = \frac{11}{18}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[0{,}19\varepsilon - 0{,}15\varepsilon^2 + \frac{8{,}67}{33}k^2\left(0{,}07\varepsilon - 0{,}14\varepsilon^2\right)\right] \qquad (60)$$

Wir stellen fest, daß ebenso wie bei der L_I-Schale der Einfluß der Retardierung nur gering ist.

Die numerische Berechnung einzelner Punkte führt auf die bei der L_I-Schale bereits ausgewerteten Integrale U_y, V_y, mit denen nach (56) die Ausdrücke K, O folgendermaßen zusammenhängen:

$$\left.\begin{array}{l} K = \\ O = \end{array}\right\} N \left\{\begin{array}{l} (1-\frac{2}{N})(U_x+U_y) + \varkappa\,(V_x+V_y) \\ k\cdot\beta\,[U_x - U_y + \varkappa\,(V_x - V_y)] \end{array}\right.$$

mit $N^2 = N_0^2\,\frac{e^{\pi|\varkappa|}\cdot(1+k\varkappa)}{4\pi}\cdot 4^3\cdot|k|^{2s-1}$; $k^2 = \frac{N-2s_0}{3N+2s_0+4}$; $\beta = \sqrt{\frac{1-k\varkappa}{1+k\varkappa}}$,

während die dortigen Integrale U_x, V_x mit 1+k / 1-k zu multiplizieren sind, da $\varkappa$ sein Vorzeichen wechselt. Die in Tabelle 10 angeführten Werte zeigen einen mit dem Abstand von der Kante zunehmenden positiven relativistischen Einfluß, und zwar für den Übergang nach S 1/2.

Tabelle 10.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta=0{,}2$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,0147	0,0172	0,0131
	Δ	+0,64	+0,70	
$\beta=0{,}4$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,00246	0,00322	0,00192
	Δ	+1,47	+1,50	

Entsprechend führt der Übergang von L_{II} nach D 3/2 auf dieselben U_y, V_y-Integrale, die sich bei Kombination der L_I-Schale mit P 3/2 ergaben, während die dortigen U_x, V_x-Werte mit 1-2k / 1+2k zu multiplizieren sind. Die in Tabelle 11 angeführten Werte des Matrixelements zeigen wiederum einen sich im Sinne einer Vergrößerung des Matrixelements auswirkenden relativistischen Einfluß.

Tabelle 11.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta=0{,}2$	$Z^4\lvert Z\rvert^2$	0,2728	0,3615	0,2257
	Δ	1,09	1,34	
$\beta=0{,}4$	$Z^4\lvert Z\rvert^2$	0,03289	0,05102	0,02638
	Δ	1,29	2,08	

Kombination beider Übergänge ergibt nun, wie Tabelle 12 zeigt, wegen des überwiegenden Beitrags des Übergangs nach der D-Terme einen ähnlichen Verlauf der relativistischen Korrektur wie dort.

Tabelle 12.

Z	60	92	Unrelat.
$\beta = 0 \quad \Delta =$	-0,17	-0,15	---
$\beta = 0{,}2 \quad \Delta =$	+1,07	+1,31	---
$\beta = 0{,}4 \quad \Delta =$	+1,30	2,04	---

Während bei negativer relativistischer Abweichung (s. K- und L_I-Schale) die Größe Δ mit zunehmender Ordnungszahl kleiner wurde, verhält sie sich hier bei mit dem Abstand von der Kante zunehmendem positiven relativistischen Effekt gerade umgekehrt. Nach dem Ergebnis der Entwickelung des Quadrupols (Gl. 60) darf man der L_{II}-Kante den relativistischen Einfluß Null zuordnen.

§ 7. Die Übergänge von der L_{III}-Schale

Wegen der stärkeren Entartung der L_{III}-Schale ist die Zahl der möglichen Übergänge aus diesem Niveau größer als in bisherigen Fällen. Der durch den Wert 1/2 der magnetischen Quantenzahl gekennzeichnete Zustand:

$$\psi^{\varkappa}_{L\,1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}} = \begin{cases} -\sqrt{\frac{2}{3}}\, i\, F\, Y^{\varkappa}_{20} \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}\, i\, F\, Y^{\varkappa}_{21} \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\, G\, Y^{\varkappa}_{10} \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}\, G\, Y^{\varkappa}_{11} \end{cases}$$

kombiniert mit den Diracschen Eigenfunktionen:

$$\psi_{2\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}} = \begin{cases} +\sqrt{\frac{2}{3}}\, i f\, Y_{10} \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}\, i f\, Y_{11} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\, g\, Y_{20} \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\, g\, Y_{21} \end{cases} \qquad \psi_{2\,\frac{5}{2}\,\frac{1}{2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{7}}\, i f\, Y_{30} \\ \sqrt{\frac{4}{7}}\, i f\, Y_{31} \\ \sqrt{\frac{3}{5}}\, g\, Y_{20} \\ -\sqrt{\frac{2}{5}}\, g\, Y_{21} \end{cases} \qquad \psi_{0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{3}}\, i f\, Y_{10} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\, i f\, Y_{11} \\ g\, Y_{00} \\ 0 \end{cases}$$

wobei für unser Matrixelement folgende Zusammenhänge mit den bekannten Integralen K, O über die Radialeigenfunktionen resultieren:

$$|Z_{L_{II}}^{0\,\frac{1}{2}}|^2 = \frac{2}{9}\,|K+O|^2_{\kappa_I=-1}; \quad |Z_{L_{III}}^{2\,\frac{3}{2}}|^2 = \frac{1}{225}\,|K+O|^2_{\kappa_I=2}; \quad |Z_{L_{III}}^{2\,\frac{5}{2}}|^2 = \frac{6}{25}\,|K+O|^2_{\kappa_{II}=-3}$$

Der andere Zustand mit m = 3/2

$$\psi^{*}_{L\,1\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}} = \begin{cases} -\sqrt{\frac{1}{5}}\, i F\, Y^{*}_{21} \\ -\sqrt{\frac{4}{5}}\, i F\, Y^{*}_{22} \\ G\, Y^{*}_{11} \\ 0 \end{cases}$$

tritt gemäß den Auswahlregeln zusammen mit:

$$\psi_{2\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}} = \begin{cases} i f\, Y_{11} \\ 0 \\ \sqrt{\frac{1}{5}}\, g\, Y_{21} \\ \sqrt{\frac{4}{5}}\, g\, Y_{22} \end{cases} \qquad \psi_{2\,\frac{5}{2}\,\frac{3}{2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{7}}\, i f\, Y_{31} \\ \sqrt{\frac{5}{7}}\, i f\, Y_{32} \\ \sqrt{\frac{4}{5}}\, g\, Y_{21} \\ -\sqrt{\frac{1}{5}}\, g\, Y_{22} \end{cases}$$

wobei sich ergibt:

$$|Z_{L_{III}\,\frac{3}{2}}^{2\,\frac{3}{2}}|^2 = \frac{4}{225}\,|K+O|^2_{\kappa_I=2}; \qquad |Z_{L_{III}}^{2\,\frac{5}{2}}|^2 = \frac{4}{25}\,|K+O|^2_{\kappa_{II}=-3};$$

Insgesamt erhält man also:

$$|Z_{L_{II}}^{0}|^2 = \frac{2}{9}\,|K+O|^2_{\kappa_{II}=-1}; \qquad |Z_{L_{III}}^{2}|^2 = \frac{2}{45}\,|K+O|^2_{\kappa_I=2} + \frac{2}{5}\,|K+O|^2_{\kappa_{II}=-3}; \tag{61}$$

Die Radialeigenfunktion der L_{III}-Schale heißt

$$\left.\begin{aligned} G &= \\ F &= \end{aligned}\right\} N_0 \begin{cases} e^{-\frac{\varrho}{2}} \cdot \varrho^{z_0-1} \\ \sqrt{\frac{2-z_0}{2+z_0}} \cdot e^{-\frac{\varrho}{2}} \cdot \varrho^{z_0-1} \end{cases} \tag{62}$$

mit $\qquad N_0^2 = \frac{(2+z_0)}{4\cdot(2z_0)!}; \qquad z_0 = \sqrt{4-\varepsilon}$

Als Entwickelung an der Kante erhält man für den Übergang nach D 3/2 mittels der aus (21) für $t = 2$, $\alpha = z_0 = \sqrt{4-\varepsilon}$ folgenden fünf Integrale:

$$\left.\begin{aligned} U_{z_0} &= \\ U_{z_0+1} &= \\ V_{z_0} &= \\ V_{z_0+1} &= \\ V_{z_0+2} &= \end{aligned}\right\} \left(\frac{4}{e}\right)^4 \begin{cases} 8(1-0{,}77\varepsilon) \\ 16(1-1{,}77\varepsilon) \\ 1-1{,}02\varepsilon \\ -4(1+0{,}23\varepsilon) \\ -88(1-0{,}55\varepsilon) \end{cases}$$

den Ausdruck:

$$\left|Z_{L_{II}}^{2\frac{3}{2}}\right|^2 = \frac{16}{135}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1-0{,}85\varepsilon+0{,}22\varepsilon^2+\frac{49}{3}k^2(1-0{,}68\varepsilon+0{,}13\varepsilon^2)\right] \quad (63)$$

Entsprechend für den Term mit der entgegengesetzten Spinrichtung:

$$\left|Z_{L_{II}}^{2\frac{5}{2}}\right|^2 = \frac{16}{15}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1-0{,}13\varepsilon+\frac{49}{3}k^2(1-0{,}16\varepsilon)\right] \quad (64)$$

Schließlich sei noch das Matrixelement des Übergangs nach der S-Terme angegeben:

$$\left|Z_{L_{II}}^{0\frac{1}{2}}\right|^2 = \frac{1}{27}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\cdot\left[1+2{,}05\varepsilon+0{,}28\varepsilon^2+\frac{40}{3}k^2(1+1{,}99\varepsilon+0{,}38\varepsilon^2)\right] \quad (65)$$

Wir kombinieren nun gemäß Gl. (61) die Gleichungen (63), (64) und (65) und finden:

$$|Z|^2_{L_{II}} = \frac{32}{27}\cdot\left(\frac{4}{e}\right)^8\left[1-0{,}13\varepsilon+0{,}03\varepsilon^2+\frac{8{,}67}{33}k^2(1-0{,}16\varepsilon+0{,}03\varepsilon^2)\right] \quad (66)$$

Die numerische Berechnung einzelner Punkte schließt sich beim Übergang nach D 3/2 der Gl. (39) mit $t = 2$, $\kappa_0 = -2$ an. Nach Gleichung (35) mit

$$N^2 = \frac{e^{\pi|n|}(1+kn)(2+z_0)}{16\,\pi\,(2z_0)!}\cdot 4^3\,|k|^{2s-1}$$

und (61) erhält man die in Tabelle 13 angeführten Werte des Matrixelements:

Tabelle 13.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta=0{,}2$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,02930	0,01510	0,04514
	Δ	-1,84	-1,48	
$\beta=0{,}4$	$Z^4\,\lvert Z\rvert^2$	0,00256	0,00076	0,00528
	Δ	-2,70	-1,90	

Wir werden der Berechnung des Übergangs nach D 5/2 die Gl. (40) mit $\kappa_0 = 2$, $\kappa_{II} = -3$, $\gamma_{II} = \sqrt{9 - \varepsilon^2}$, $t = 2$ zugrunde legen. Da wegen $\frac{4}{3}[s(1-s)]^{\gamma_{II}}$ der Integrand in (40b) stärker abklingt als in bisherigen Fällen, wird dessen Auswertung hier entsprechend einfacher, und nach Gl. (35) mit obigem N^2 und (61) folgen die Werte:

Tabelle 14.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta = 0{,}2$	$Z^4 \lvert Z \rvert^2$	0,3887	0,3688	0,4063
	Δ	-0,23	-0,21	
$\beta = 0{,}4$	$Z^4 \lvert Z \rvert^2$	0,04339	0,03878	0,04750
	Δ	-0,45	-0,41	

Große rechnerische Schwierigkeiten dagegen bereitet die Behandlung des Übergangs nach S 1/2. Die Integraldarstellung (41b) führt dann nicht mehr zum Ziel, da der Integrand wegen $\frac{4}{3}[s(1-s)]^{\gamma_I}$ bei $s = 0$ unbegrenzt anwächst. Es wurde versucht, die dem Integral I nach (37) entsprechende hypergeometrische Reihe durch numerische Integration deren Differentialgleichung nach dem Verfahren von Runge & Kutta zu erhalten. Jedoch erwies sich die dabei aufzuwendende Mühe als ziemlich beträchtlich, so daß sich Verfasser bei diesem wenig ins Gewicht fallenden Übergang mit der Entwickelung an der Kante (Gl. 65) begnügte. Nach den bisherigen Ergebnissen darf man wohl als wahrscheinlich annehmen, daß die Größe Δ von der Kante aus immer stärker ansteigt und daher folgende Werte des Matrixelements ansetzen:

Tabelle 15.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta = 0{,}2$	$Z^4 \lvert Z \rvert^2$	0,0387	0,0564	0,0262
	Δ	+2,50	+2,57	
$\beta = 0{,}4$	$Z^4 \lvert Z \rvert^2$	0,00612	0,00938	0,00385
	Δ	+3,00	+3,20	

Wir finden nun durch Kombination der drei Teilübergänge (Gl. 63 bis 65; Tab. 13 bis 15) folgenden relativistischen Effekt bei dem für die L_{III}-Absorption maßgebenden Matrixelement:

Tabelle 16.

Z		60	92	Unrelat.
$\beta = 0$	$\Delta =$	-0,13	-0,12	--
$\beta = 0{,}2$	$\Delta =$	-0,23	-0,17	--
$\beta = 0{,}4$	$\Delta =$	-0,42	-0,30	--

Auf graphische Darstellung der Tabellen 4 bis 16 ist verzichtet.

§ 8. Einfluß der Abschirmung

Die L_I-Absorption, welche in § 5 Gegenstand der Untersuchung des relativistischen Einflusses war, wird unrelativistisch wiedergegeben durch [1]:

$$\tau = \frac{16\cdot\pi^3\cdot e^2\cdot\nu}{c}\cdot|Z|^2,$$

$$|Z|^2 = \frac{2\cdot 4^6}{3\cdot\pi}\cdot\frac{(1+|k|^2)\cdot e^{-4/n|\operatorname{arc\,tg}\,2/k|}}{(1-e^{-2\pi/n|})(1+4|k|^2)^6} \qquad (67)$$

Wie bei der K-Schale verfahren, so soll auch hier eine innere und äußere Abschirmung des Coulombpotentials eingeführt werden. Wir wählen den Slaterschen Wert S = 4,15 und als äußeres Potential die von Hönl [2] experimentell aus der Ionisierungsspannung bestimmten V_0-Werte. Dann ist der in das Matrixelement eingehende Parameter $|k|^2$ zu ersetzen durch

$$2\beta - \frac{2V_0}{(Z-s)^2}.$$

Da die relativistische Energie der abgeschirmten L_I-Schale

$$W_{L_I} = \frac{(Z-s)^2}{8}\left(1+\frac{5}{16}\varepsilon+\frac{21}{128}\varepsilon^2\right)-V_0$$

beträgt, resultiert folgender Zusammenhang mit der Wellenlänge:

$$\frac{\lambda_K}{\lambda}-1 = 4\cdot\frac{2\beta-\frac{2V_0}{(Z-s)^2}}{1+\frac{5}{16}\varepsilon+\frac{21}{128}\varepsilon^2-\frac{3V_0}{(Z-s)^2}} \qquad (68)$$

Auf das so durch die Abschirmung abgeänderte Matrixelement wenden wir die in Tab. 9 niedergelegten Ergebnisse der relativistischen Rechnung an und erhalten die in Tabelle 17 angegebenen Werte, welche in Fig. 7 als Funktion der Wellenlänge logarithmisch dargestellt sind.

Tabelle 17.

E	2 V_0 (at)	$\beta = 0$ $Z^4\|Z\|^2$	$\beta = 0{,}2$ λ/λ_K	$\beta = 0{,}2$ $Z^4\|Z\|^2$	$\beta = 0{,}4$ λ/λ_K	$\beta = 0{,}4$ $Z^4\|Z\|^2$
40	154	95,2	0,329	1,292	0,168	0,192
46	199	78,3	0,336	1,256	0,175	0,185
60	327	62,8	0,354	1,155	0,188	0,179
74	466	47,2	0,372	1,080	0,204	0,173
92	666	33,0	0,398	0,984	0,225	0,167

1) Vgl. H. Bethe, Handb. d. Phys., 2. Aufl., S. 480.
2) H. Hönl, a.a.O., S. 13.

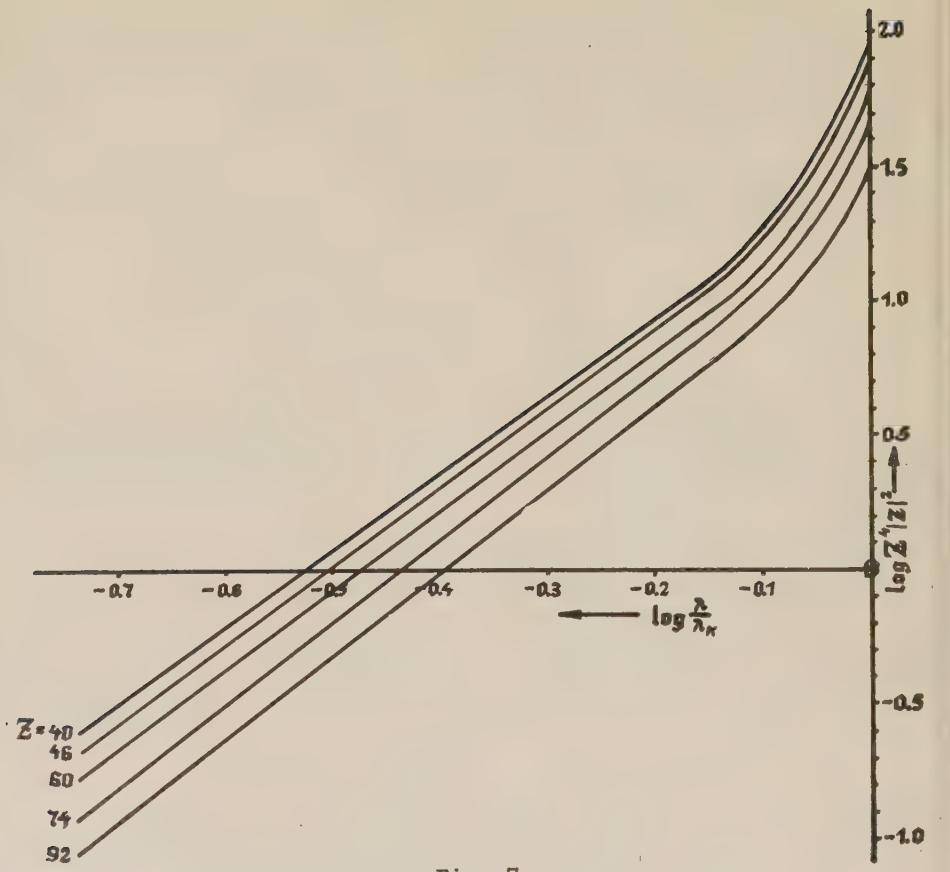


Fig. 7.

Die entsprechenden Überlegungen seien nun für die L_{II}-Absorption durchgeführt, welche sich unrelativistisch zu

$$\tau_{a_{L_I}} = \frac{8}{3}\pi^3 \cdot \frac{e^2 \nu}{c} \cdot |Z|^2;$$

$$|Z|^2 = \frac{1}{9} \cdot 4^8 \cdot \frac{e^{-4|n|\operatorname{arctg} 2|k|}}{(1+4|k|^2)^7} \cdot \frac{\left(1+\frac{16}{11}|k|^2\right)}{\left(1-e^{-2\pi|n|}\right)} \qquad (69)$$

ergibt. Wie bei der L_I-Absorption verfahren, setzen wir $|k|^2 = 2\beta - \frac{2V_0}{(Z-s)^2}$ und erhalten mit $s = 4{,}15$ und V_0 nach Hönls Messungen bei Berücksichtigung des relativistischen Einflusses nach Tabelle 12 die in Tabelle 18 angeführten Werte des Matrixelements.

Die logarithmische Darstellung des Matrixelements als Funktion der Wellenlänge, welche ebenfalls aus Gleichung (66) resultiert, gibt ein ähnliches Bild wie Fig. 7.

Tabelle 18.

Z	V_o	$\beta = 0$	$\beta = 0{,}2$		$\beta = 0{,}4$	
		$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$	λ/λ_K	$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$	λ/λ_K	$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$
40	171	268,5	0,3175	0,700	0,157	0,0570
46	220	211,5	0,328	0,675	0,1656	0,0568
60	352	146,0	0,348	0,664	0,1822	0,0600
74	510	115,5	0,367	0,689	0,1978	0,0673
92	740	92,3	0,394	0,759	0,219	0,0850

Da die relativistische Energie der L_{III}-Schale bei Abschirmung

$$W_{L_{III}} = \frac{(Z-s)^2}{8}\left(1 + \frac{\xi}{16} + \frac{\xi^2}{128}\right) - V_o$$

beträgt, besteht zwischen dem Parameter β und der Wellenlänge folgender Zusammenhang:

$$\frac{\lambda_K}{\lambda} - 1 = 4 \cdot \frac{2\beta - \frac{2V_o}{(Z-s)^2}}{1 + \frac{\xi}{16} + \frac{\xi^2}{128} - \frac{3V_o}{(Z-s)^2}} \qquad (70)$$

Für das Matrixelement der L_{III}-Absorption, welches den doppelten unrelativistischen Wert des der L_{II}-Absorption besitzt, ergibt die relativistische Korrektur nach Tab. 16 und die Abschirmung nach den in Tab. 18 angeführten Hönlschen Werten:

Tabelle 19.

Z	$\beta = 0$	$\beta = 0{,}2$		$\beta = 0{,}4$	
	$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$	λ/λ_K	$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$	λ/λ_K	$Z^4 \cdot \lvert Z\rvert^2$
40	531	0,307	1,258	0,1505	0,0998
46	416	0,315	1,175	0,158	0,0954
60	284	0,328	1,045	0,169	0,0872
74	222	0,3365	0,965	0,1775	0,0815
92	173,5	0,347	0,884	0,1865	0,0754

§ 9. Die experimentellen Werte der K-Absorption und deren Vergleich mit der Theorie

Messungen der Gesamtschwächung, aus denen allein die experimentellen Werte für die K-Absorption resultieren, enthalten neben dem Streukoeffizienten die Absorption in den höheren Schalen. Dabei wurde stets, und mit Vervollkommnung der experimentellen Anordnung durch Steigerung der Monochromasie (Differenzverfahren von Küstner) des Röntgenstrahls und günstiger Gestaltung des Absorbers umso mehr, die Linearität des Verlaufs bei doppelt logarithmischer Darstellung konstatiert, die in der Gesetzmäßigkeit

$$\mu = C \cdot \lambda^n = \mu_{Kante}\left(\frac{\lambda}{\lambda_K}\right)^n$$

ihren mathematischen Ausdruck findet.

In Tabelle 20 ist statt des atomaren Absorptionskoeffizienten, der dem Quadrat der Ordnungszahl umgekehrt proportional ist, für kurz- und langwelligen Absorptionsast beiderseits der Kante die Größe $Z^2 \cdot \mu_{at}$ angegeben, deren Verlauf mit der Ordnungszahl den Einfluß des Abschirmungs- und relativistischen Effekts unmittelbar vor Augen führt. Da die Experimentatoren es auf das Verhältnis des Absorptionskoeffizienten an kurz- und langwelliger Seite der Kante, den sogenannten Absorptionssprung, abgesehen haben, haben sie mehr Gewicht gelegt auf einwandfreie Bestimmung der Größe des Anstiegs der Geraden, den Exponenten n, als auf den Faktor C, der in den Sprung nur in der Verbindung C_k / C_l eingeht. Trägt man $Z^2 \cdot \mu_{at}$ und n als Funktion der Ordnungszahl auf, so konstatiert man durch graphische Interpolation unter besonderer Berücksichtigung der neuesten Meßergebnisse aus dem Küstnerschen Institut als Ergebnis des Experiments, also als Zusammenfassung der Spalten 2 und 3 in Tab.20 folgende Gesetzmäßigkeiten:

$$\begin{aligned} Z^2 \cdot \mu_{at_k} &= 4636 - 94{,}67 \cdot Z + 1{,}164 \cdot Z^2 - 5{,}297 \cdot 10^{-3} \cdot Z^3 \\ Z^2 \cdot \mu_{at_l} &= 260 + 2{,}95 \cdot Z - 0{,}015 \cdot Z^2 \end{aligned} \qquad (71)$$

$$\begin{aligned} n_K &= 3{,}074 - 0{,}0145\, Z + 0{,}1104\, Z^2 \cdot 10^{-4} \\ n_l &= 2{,}765 + 3{,}66 \cdot 10^{-4} Z - 0{,}233 \cdot 10^{-4} \cdot Z^2 \end{aligned} \qquad (72)$$

Uns kommt es nun auf den Teil der Gesamtschwächung an, der auf die Photoabsorption in der K-Schale entfällt. Wir dürfen wohl annehmen, daß der langwellige Ast bei Fehlen der K-Absorption gerad linig weiter verliefe. Wenn wir nun, was sicher eine gute Näherung ist, den Beitrag der K-Schale an der in sämtlichen höheren Schalen erfolgenden Streuung vernachlässigen, dann stellt die Differenz $\mu_K - \mu_l$ die K-Photoabsorption, für die wir uns interessieren, dar. Auch für sie sei, wie es auch in einigen experimentellen Arbeiten geschieht, die Linearität des Verlaufs bei doppelt logarithmischer Darstellung angesetzt, was bei Z = 29, wo $n_K = n_1$ ist, schon aus dem oben angeführten Verlauf der Gesamtschwächung resultiert. Zur Bestimmung der damit eingeführten Ersatzfunktion

$$\tau = \mu_K \left(\frac{\lambda}{\lambda_K}\right)^{n_K} - \mu_l \left(\frac{\lambda}{\lambda_K}\right)^{n_l} = \tau_K \left(\frac{\lambda}{\lambda_K}\right)^{n} \qquad (73)$$

bzw. $$\tau \cdot \lambda = \text{const.} \cdot |Z|^2 = \text{const.} \cdot (|Z|^2)_K \cdot \frac{\lambda^{n+1}}{\lambda_K^{n}} \qquad (73')$$

bedarf es zweier Relationen: wir verlangen, daß an der Kante die Funktionswerte und ihre Ableitung nach λ, der Anstieg der logarithmischen Geraden, übereinstimmen; also:

$$\lambda = \lambda_{Kante}: \quad \mu_K - \mu_l = \tau_K; \quad n_K \mu_K - n_l \mu_l = n \tau_K \qquad (73'')$$

Da sich n_K und n_l nur wenig voneinander unterscheiden und μ_l neben μ_K nicht ins Gewicht fällt, gibt die eingeführte Ersatzfunktion die Ausgangsfunktion in einem ziemlichen Bereich gut wieder. Der Fehler wird, unserem Ansatz gemäß, mit Entfernung von der Kante anwachsen, und zwar beträgt er für den größten vorkommenden Unterschied im Exponenten bei $\lambda = \frac{1}{2} \lambda_{Kante}$ nur 3 ‰ und bei $\lambda = 1/10\ \lambda_{Kante}$ erst 10 ‰. Als K-Absorption an der Kante ergibt sich hiernach: $Z^2 \tau_{Kante} = 4376 - 97{,}62\, Z + 1{,}197 Z^2 - 5{,}297 \cdot 10^{-3} \cdot Z^3$ (74)

Tabelle 20.

Z	$Z^2 \mu_{at_K} \cdot 10^{20}$	$Z^2 \mu_{at_L} \cdot 10^{20}$	n_K	n_L	Autor	$\tau_{at} / \lambda_{Kante} \cdot 10^{22}$	n
6	6740		2,88		M & L		
13	3515	263	2,731	2,735	Bm	242	2,731
	3720		2,822		Gk		
	4480		2,92		J		
	4480		2,91		Bh		
	4480		2,92		A +		
16	4170		2,946		Gk		
	3120	275	2,7	2,8	W	222	2,69
17	3075	296	3,0	2,7	W	220	3,0
18	3335	310	2,6	2,7	W	242	2,59
26			2,720	2,863	Gh		
	2840		2,74		M & L		
	3120	340	2,87	2,92	A +		
27			2,570	2,759	Gh		
28	2700	344	2,760	2,601	Gk	202,5	2,783
			2,619	2,721	Gh		
			2,783		R		
	2625	328	2,68	2,97	M & L	197,5	2,64
	2775	344	2,76	2,76	J	209	2,76
	2630	320	2,75	2,92	A +		
29	2760		2,72		Bh		
	2820	328	2,75	2,74	J	215	2,75
	2645	330	2,755	2,795	Gk	200	2,749
			2,612	2,711	Gh		
			2,669		R		
	2540	336	2,7	2,7	V	190,5	2,7
	2760	330	2,74	2,81	M & L	209,5	2,73
	2760	330	2,7	2,92	A +		
30	2700	350	2,61	2,87	M & L	204	2,57
	2820	350	2,6	2,92	A +		
32			2,459	2,792	Gh		
33			2,410	2,604	Gh		
34			2,334	2,631	Gh		
	2675	380	2,683	2,691	Sch	203	2,682
	2700		2,751		M		
35	2530		2,721		M		
37			2,418	2,796	Gh		
38			2,438	2,845	Gh		
40			2,648	2,733	Gh		
42	2550	400	2,782	2,859	Gk	197	2,768
			2,617		R		
	2515	406	2,6	2,7	V	193	2,58
	2400		2,75		M & L		

Z	$Z^2 \mu_{kat} \cdot 10^{20}$	$Z^2 \mu_{at} \cdot 10^{20}$	n_k	n_l	Autor	$\tau_{at}/\lambda \cdot 10^{22}$	n
44			2,645	2,755	Gh		
45	2000	374	2,452	2,701	Gk	150,4	2,40
			2,520	2,754	Gh		
46	2360		2,475	2,712	Gh		
47	2520	364	2,75	2,94	M & L	201,5	2,72
	2070	350	2,687	2,738	Gk	161	2,677
			2,339	2,760	Gh		
			2,460		R		
	2120	334	2,5	2,7	V	167	2,46
		352		2,725	Sch		
	2650	346	2,92	2,92	A +		
48	1935	370	2,554	2,712	Gk	147	2,516
			2,305	2,722	Gh		
		377		2,709	Sch		
	2250		2,631		M		
49	2065	350		2,983	Gk		
50	2030	386	2,64	2,67	K		
	2030	368	2,632	2,738	Gk	157	2,608
		353		2,92	M & L		
			2,543	2,838	Gh		
			2,653		R		
	1970	338	2,6	2,7	V	154	2,58
	2640	346	2,92	2,92	A +		
52	2290	425	2,562	2,744	Sch	177	2,52
53	2100	370	2,565	2,749	M	165	2,526
54	2100	332	2,90	2,79	Wh	181,4	
56	2105	405	2,618	2,633	M	164	2,614
58	2200	412	2,641	2,666	M	173	2,635
73	1820	390	2,670	2,672	Gk	146,5	2,67
74	1725	370		2,782	Gk		
	1390	307	2,92	2,92	A +		
78		370		3,055	Gk		
	1925	310			A +		
79		373		2,703	Gk		
	1830	310			A +		
81				2,625	M		
82	1520	330			A +		
				2,341	Gk		

A = Allen, Bh = Backhurst, J = Jönsson, Literaturangaben s. Handbuch d. Phys. 23, Teil 2, Artikel W. Bothe;
+ soll darauf hinweisen, daß an der betreffenden Stelle τ_{at} statt μ_{at} angegeben ist. Die anderen Autoren siehe S. 44.

. Ferner erhält man für den Anstieg der Geraden, in parabolischer Form angenähert dargestellt:

$$n = 3{,}094 - 0{,}0140\,Z + 0{,}636 \cdot 10^{-4} Z^2 + 0{,}442 \cdot 10^{-6} Z^3. \qquad (75)$$

In Tabelle 20 wurden, soweit die von einzelnen Autoren angegebenen Werte vollständig sind, die nach unserem Verfahren (Formel 73') sich ergebenden Einzel-n-Werte für gewisse Elemente mit angeführt. Da nur knapp die Hälfte der Meßwerte vollständig ist, wären durch eine solche Einzeldarstellung von τ und n viele Beobachtungen für den Vergleich verloren gegangen, wodurch sich eine wenig erschöpfende Auswertung des mit großer Mühe gewonnenen experimentellen Materials ergeben hätte. Deshalb wurden außerdem aus allen Beobachtungen die Formeln (71) und (72) gewonnen und zu (74) bzw. (75) verarbeitet, worin die Gesamtheit der Meßwerte (nach Ausgleichsrechnung) zum Ausdruck kommt.

Ein solch umfassender Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den Aussagen der Theorie wurde bisher nur für die K-Absorption an der Kante durchgeführt [1]. Dagegen haben sich einige Autoren für einzelne untersuchte Elemente auch um die Wiedergabe des gefundenen Verlaufs der Absorption mit der Wellenlänge bemüht, wenn auch stets ohne Erfolg.

Wir betrachten in Tab. 21 den Anstieg der Kurven von Fig. 5 an der Stelle $\lambda / \lambda_K = 0{,}75$, wo etwa der geradlinige Teil aufhört, und bei $\lambda / \lambda_K = 0{,}90$, wo der Anstieg im Bogen ungefähr seinen mittleren Wert annimmt, und vergleichen ihn mit den aus Formel (73') und (75) folgenden (n+1)-Werten. Man erkennt, daß der Mittelwert aus beiden die experimentellen Werte annähernd wiedergibt. Der Vergleich des experimentell nach Formel (74) ermittelten τ_K ergibt gegen die Erörterung bei Seiler [1] nichts nennenswert Neues.

Tabelle 21.

Z	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}75$	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}90$	$n+1$ beob. Werte
14	2,44	5,10	3,91
24	2,66	5,15	3,81
42	2,93	4,70	3,64
60	3,04	4,55	3,582
74	3,08	4,20	3,58
92	3,14	3,95	3,58

1) S. K. Seiler, a.a.O., S. 365.

§ 10. Die drei L-Absorptionskoeffizienten und deren Vergleich mit der Theorie

Wie bei der K-Absorption, so konstatieren die Experimentatoren auch für die einzelnen Zweige der L-Absorption einen linearen Verlauf bei doppelt logarithmischer Darstellung: ja selbst in dem weiten Bereich zwischen K- und L_I-Kante. In erster Linie sind es auch hier Messungen der Gesamtschwächung, aus denen das experimentelle Material besteht. Daneben bemühte sich Schwarz [1], mittels der mit der Absorption verbundenen sekundären Strahlung Aufschluß zu erhalten darüber, wie sich die gesamte Absorption auf die einzelnen Schalen verteilt, also gerade das, worauf es uns ankommt. Die gewonnenen Ergebnisse sind jedoch so ungenau, daß sie die lineare Extrapolation der einzelnen Zweige nach kürzeren Wellenlängen hin, die wir hier wie bei der K-Schale vornehmen wollen, nicht zu stützen vermögen. Aus den Angaben der Autoren wurden die in Tabelle 22 aufgeführten Werte an den Kanten errechnet, aus denen sich durch Differenzbildung die einzelnen Teilabsorptionen ergeben. Wegen des geringen Materials über den Verlauf der mittleren Zweige müssen wir auf die Aufstellung einer empirischen Gesetzmäßigkeit für die einzelnen Teilabsorptionen verzichten.

Fassen wir nun in Fig. 7 den Anstieg an den Stellen $\lambda / \lambda_K = 0{,}5$ und $\lambda / \lambda_K = 0{,}8$ ins Auge, dann ergibt sich nach Tab. 23 ein langsames Absinken mit zunehmender Ordnungszahl, worauf auch die experimentellen Ergebnisse hinzuführen scheinen.

Weitere Aussagen lassen die großen Differenzen zwischen den einzelnen Meßergebnissen nicht zu.

Tabelle 22.

Z	an L_I-Kante	$Z^2 \cdot \mu_{at} \cdot 10^{19}$ an L_I-Kante	an L_{II}-Kante	n_I	n_{II}	n_{III}	n_{IV}	Autor
47	5990		----	2,565			2,530	Bm
	----		1570					
	1140							
	6350	6470	5140	3,0	3,0	3,0	3,0	Wf
	5140	4405	1470					
	1000							
	6480		----	2,6			2,92	A+
	----		1780					

48	6000			2,506			2,578	Bm

	1160							
50	6200		1770	2,743			2,50	Bm
	----		----					
	1285							
	6220		----	2,6			2,92	A+
	----		1740					
				2,738				Gk

1) s. H. Schwarz, Ann. d. Phys. 23, 1935, S. 571.

Tabelle 22. (Fortsetzung)

Z	an L_I-Kante	$Z^3 \cdot \mu_{at} \cdot 10^{19}$ an L_{II}-Kante	an L_{III}-Kante	n_I	n_{II}	n_{III}	n_{IV}	Autor
52	6270		----	2,543			2,566	Bm

	1275							
57				2,601			2,345	K&A
58				2,585			2,113	K&A
74				2,627		2,443	2,560	K&A
	5060		----	2,92			2,92	A +
	----		1520					

78				2,6	2,6	2,6	2,64	Bh
	4260	4290	4110	3,0	3,0	3,0	3,0	Wf
	3760	2710	1535					
	886							
	4860		----	2,92			2,92	A +
	----		1540					

79				2,91	2,91	2,64	2,61	Bh
				2,56	2,56	2,43	2,65	K
	4130	4260	4065	3,0	3,0	3,0	3,0	Wf
	3730	2620	1485					
	855							
				2,55	2,94	2,64	2,78	U&P
	3610	4570	3740	2,627	2,627	2,485	2,485	Sch
	3100	3410	1550					
	975							
				2,407			2,591	K&A
	4750		----	2,92			2,92	A +
	----		1570					

80	3840	3620	3800	2,56	2,56	2,59	2,66	U
	3240	2606	1560					
	845							
				2,497		2,868	2,401	K&A
				2,490		2,827	2,49	K&A
81				2,64	2,50	2,35	2,57	P
				2,625				M
	3850							

82	3530	3450	3820	2,572	2,572	2,572	2,543	Sch
	3100	2510	1600					
	985							
				2,426		2,792	2,607	K&A
				2,62	2,54	2,46	2,69	P
				2,92			2,92	A +
	4950		----					
	----		1530					

83				2,56	2,54	2,52	2,60	P
				2,547	2,547	2,599	2,599	Sch
	3480	3230	3660					
	2910	2430	1530					
	915							
				2,5	4,0	3,0	2,715	C
				2,514		2,539	2,756	K&A
90								
				2,422		2,462	2,591	K&A
92								

(Autorenverzeichnis s. S. 44)

Bm = Biermann, Ann. d. Phys. 26, 740, 1936
C = Carr, Phys. Rev. 46, 92, 1934
Gh = Grothey, Ann. d. Phys. 25, 577, 1936
Gk = Großkurth, Ann. d. Phys. 20, 197, 1934
K = Küstner, Ztschr. f. Phys. 70, 468, 1931
K & A= Küstner und Arends, Ann. d. Phys. 25, 385, 1936
M & L= Martin und Lang, Proc. Roy. Soc. London, 137, 199, 1932
M = Müller, Ann. d. Phys. 32, 625, 1938
P = Patten, Phys. Rev. 45, 662, 1934
R = Rindfleisch, Ann. d. Phys. 28, 409, 1937
Sch= Schulz, Ann. d. Phys. 27, 1, 1936
U = Uber, Phys. Rev. 38, 217, 1931
V = Voges, Ztschr. f. Phys. 80, 542, 1933
Wh = White, Phys. Rev. 46, 865, 1934
W = Woernle, Ann. d. Phys. 5, 475, 1930
Wf = Wolf, Ann. d. Phys. 16, 973, 1933

Tabelle 23.

Z	bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}5$	bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}8$
40	2,90	4,43
46	2,96	4,56
60	2,96	4,45
74	3,10	4,34
92	3,11	4,29

Wir wollen nun die Fig. 7 entnommenen Werte der L_I-Absorption an der L_I-Kante in Tabelle 24 vergleichen mit den experimentellen Aussagen. Solche liegen nur vor um Z = 80 herum und weisen auf einen um 25 % unter dem theoretischen Werte liegenden Mittelwert.

Tabelle 24.

Z		40	46	60	74	80	92
$Z^2 \nu_{L_I} 10^{-6}$	theor.	860	784	755	687	--	630
	exper.	--	(1200)	--	--	500	--

Entsprechend wollen wir nun mit der Absorption in den beiden anderen L-Schalen verfahren. Tabelle 25 zeigt ebenso wie Tab. 23 für die L_{II}-Schale im ganzen ein Absinken des Anstiegs mit zunehmender Ordnungszahl. Wiederum liegen die experimentellen Kanten-

werte, wie Tab. 26 zeigt, unterhalb der theoretischen, und zwar betragen sie etwa nur die Hälfte davon.

Tabelle 25.

Z	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}5$	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}8$
40	3,55	6,75
46	3,57	6,60
60	3,68	6,15
74	3,75	5,97
92	3,75	5,70

Tabelle 26.

Z		40	46	60	74	80	92
$Z^2 \tau_{L_I} \cdot 10^{11}$	theor.	4040	3490	2770	2410	--	2080
	exper.	--	--	--	--	1000	--

Dasselbe gilt nach Tabelle 28 auch für die L_{III}-Absorption.

Offenbar liegt die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment an dem großen Einfluß der Abschirmung, der den Wert des Absorptionskoeffizienten um das Drei- bis Fünffache des ohne Abschirmung erhaltenen vermehrt.

Tabelle 27.

Z	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}5$	$n+1$ bei $\lambda/\lambda_K = 0{,}8$
40	3,54	6,50
46	3,66	6,04
60	3,78	5,76
74	3,83	5,63
92	3,98	5,42

Es seien noch die Werte der Absorption an der Kante angegeben, die wiederum höher als die experimentellen liegen:

Tabelle 28.

Z		40	46	60	74	80	92
$Z^2 \tau_{L_I} \cdot 10^{11}$	theor.	8030	6890	5410	4640	--	3920
	exper.	--	3400	--	--	2200	--

Zusammenfassung

Es wird zunächst in § 1 eine Entwickelung der relativistischen kontinuierlichen Radialeigenfunktion an der Kante nach $\sqrt{\frac{I_k}{I} - 1}$ ausgeführt, die in den §§ 2, 5, 6 und 7 zur Anwendung gelangt. In § 2 erfolgt die Berechnung des für die Röntgenabsorption in der K-Schale maßgebenden Matrixelements; in §§ 5, 6 und 7 wird die Absorption in der L_I, L_{II} und L_{III}-Schale erhalten. Da der Konvergenzbereich der Entwickelung auf die unmittelbare Nachbarschaft der Kante beschränkt ist, bedarf es außerdem für einzelne kantenferne Stellen einer strengen Berechnung des Matrixelements, die für die Übergänge von der K-Schale in § 3 ausgeführt wird, für die von den drei L-Schalen in den §§ 5, 6 und 7 enthalten ist.

Wegen des abschirmenden Einflusses der inneren und äußeren Elektronen bedürfen die Ergebnisse der Rechnung einer wesentlichen Korrektur, die für die K-Absorption in § 4, für die Absorption in den drei L-Schalen in § 8 erfolgt.

Schließlich wird in den beiden letzten Paragraphen das experimentelle Material zusammengestellt und mit den Aussagen der entwickelten Theorie verglichen.

Zum Schluß möchte ich meinem hochverehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. E. F u e s , danken für das dem Fortschreiten dieser Arbeit stets bewiesene Interesse und die Bereitstellung der Hilfsmittel des Instituts sowie Herrn Dr. K. S e i l e r für die Anregung zu dieser Arbeit, seine Hilfe beim Einarbeiten und seine fördernden Ratschläge während ihrer Durchführung.

Ferner danke ich der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Breslau sowie der Firma Jos. Schneider & Co., Optische Werke in Bad Kreuznach für die mir gewährte Hilfe zur Bestreitung der Druckkosten.

Lebenslauf.

Am 12. März 1908 wurde ich, Walter Wilhelm Hanke, als Sohn des Landwirts Wilhelm Hanke und seiner Ehefrau Alwine, geb. Heyber, in Schreibendorf, Kreis Strehlen, geboren. Nach 6jährigem Besuch der ev. Volksschule meines Heimatorts kam ich an die Oberrealschule in Schweidnitz, durchlief die beiden Tertien an der höheren Knabenschule in Münsterberg, um schließlich im März 1928 in Schweidnitz die Reifeprüfung zu machen.

Daran anschließend ging ich an die Technische Hochschule zu Berlin-Charlottenburg, wo ich dem Studienplan für technische Physiker folgte und im November 1930 die Diplomvorprüfung ablegte. Ich hörte Vorlesungen bzw. besuchte Übungen bei den Dozenten Becker, Hertz, Westphal, Hofmann, Meyer, Orlich, Rothe, Scheffers, Stavenhagen und Weidert.

Die folgenden drei Studiensemester verbrachte ich an der Universität Jena, wo meine Lehrer waren: Joos, Wien, Jentzsch und König.

Nach 3jähriger Unterbrechung des Studiums ließ ich mich im Wintersemester 1935/36 an der Schlesischen Friedrich-Wilhelms-Universität in Breslau einschreiben und hörte Vorlesungen bei den Professoren Fues, Schaefer, Feigl und Suhrmann.

Vorliegende Arbeit wurde im Wintersemester 1936/37 am Institut für Theoretische Physik begonnen.

Herstellung: VDI-Verlag G.m.b.H., Berlin NW 7